

Cristina Aparecida Zapata

Algumas Classes de Métodos Pseudo
Runge - Kutta



1910000767



ALGUMAS CLASSES DE MÉTODOS
PSEUDO RUNGE-KUTTA

Cristina Aparecida Zapata

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada e
Computacional.
MAC - 027

CRISTINA APARECIDA ZAPATA

ALGUMAS CLASSES DE MÉTODOS PSEUDO RUNGE -
KUTTA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA JUNTO AO DEPARTAMENTO DE
MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL DO INSTITUTO DE BIOCÊNCIAS, LETRAS E
CIÊNCIAS EXATAS DO CÂMPUS DE SÃO JOSÉ DO RIO PRETO DA UNIVERSIDADE
ESTADUAL PAULISTA.

PROF. DR. ORIENTADOR: SEBASTIÃO PEREIRA MARTINS

São José do Rio Preto, outubro de 1997.



767/98

20



AGRADECIMENTOS

À minha família,
ao José Virgílio,
por todo o apoio,
dedico.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, sensibilizadamente, a professores, funcionários, colegas, amigos, enfim, a todos aqueles que de alguma forma auxiliaram-me durante o árduo período da elaboração deste trabalho.

Agradeço, de forma especial, ao professor orientador que possibilitou-me a oportunidade de realizar este trabalho e que, com toda a paciência e disposição, conduziu-me pelas dificuldades características da elaboração de uma tese.

Agradeço também à minha amiga, Francislaine Basso, e ao meu namorado, por todo apoio prestado, sem o qual a conclusão deste trabalho não seria possível.

Agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro, indispensável para a dedicação exclusiva ao trabalho.

Agradeço a Deus, por tudo.

RESUMO

O objetivo deste trabalho é estudar algumas classes de métodos *Pseudo Runge Kutta*, voltados para a resolução numérica de um problema de valor inicial para *Equações Diferenciais Ordinárias*.

Para tais classes de métodos, desenvolveremos os passos necessários para a obtenção das condições de ordem, procurando estabelecer uma relação entre a ordem máxima alcançável e o número de estágios considerado. Em seguida, a partir das condições de ordem, construiremos famílias de métodos e, para cada uma delas, apresentaremos alguns métodos particulares, que serão utilizados em avaliações computacionais.

INDICE

ABSTRACT

The objective of this paper is to study some classes of *Pseudo Runge-Kutta* methods, pointing to the numeric solution of a initial value problems for *Ordinary Differential Equations*.

For such classes of methods, we shall develop the necessary steps to obtain the order conditions, trying to establish a relation between the Maximum reachable order and the considered number stages. Afterwards, taking from the order conditions, we shall build families of methods and, for each one of them, we shall present some particular methods, which will be used for computational avaliations.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO	9
CAPÍTULO 1.....	11
MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA	11
1.1 Introdução	11
1.2 Métodos de Runge-Kutta	12
1.3 Conceitos Qualitativos	13
1.4 As condições de ordem	15
1.5 Algumas família de $RK(r)$	16
CAPÍTULO 2.....	21
MÉTODOS PSEUDO RUNGE-KUTTA DE PASSO 2	21
2.1 Introdução	21
2.2 Métodos Pseudo Runge Kutta de passo 2.....	22
2.3 As condições de ordem para métodos $PRK2(2)$	23
2.4 As condições de ordem para métodos $PRK2(3)$	27
2.5 As condições de ordem para o método $PRK2(4)$	33
2.6 Alguns casos pariculares de métodos $PRK2(r)$	40
CAPÍTULO 3.....	45
UMA OUTRA CLASSE DE PSEUDO RUNGE-KUTTA	45
3.1 Introdução	45
3.2 Métodos Pseudo Runge-Kutta	46
3.3 As condições de ordem para $PRK(2)$	47
3.4 As condições de ordem para $PRK(3)$	48

3.5 As condições de ordem para PRK(4).....	51
3.6 Alguns casos particulares de métodos PRK(r).....	56
CAPÍTULO 4.....	60
UMA CLASSE PARTICULAR DE MÉTODOS PSEUDO RUNGE-KUTTA	60
4.1 Introdução	60
4.2 Uma nova classe de métodos PRK(r).....	61
4.3 Um método PRK(2).....	62
4.4 A família de PRK(3)	62
4.5 A família de PRK(4)	64
CAPÍTULO 5.....	69
MÉTODOS PSEUDO RUNGE-KUTTA COM INTEGRAÇÃO A PASSO VARIÁVEL	69
5.1 Introdução	69
5.2 A formulação do método a passo variável	70
5.3 A classe de métodos PRK($\sigma, 2$)	70
5.4 A classe de métodos PRK($\sigma, 3$)	71
5.5 A classe de métodos PRK($\sigma, 4$)	72
CAPÍTULO 6.....	77
AVALIAÇÕES COMPUTACIONAIS	77
6.1 Introdução	77
6.2 Problemas testes.....	78
6.3 Os resultados	80
CONSIDERAÇÕES FINAIS	89
BIBLIOGRAFIA.....	92

INTRODUÇÃO

As *Equações Diferenciais Ordinárias (E.D.O.)* aparecem naturalmente como um modelo matemático em muitas áreas da ciências e do mundo real, principalmente em problemas que descrevem quantitativamente fenômenos físicos, químicos ou biológicos. Estas equações quando associadas a uma condição inicial, formam o que se denomina “problema de valor inicial” (*P.V.I.*).

A necessidade de se obter aproximações para a solução de um *P.V.I.*, cuja solução exata não é determinável analiticamente, tem estimulado a busca de métodos que permitam gerar, com o menor esforço computacional possível, aproximações com a precisão desejada.

Dentre as classes de métodos numéricos voltados para a resolução de uma *E.D.O.*, uma das mais utilizadas é a classe dos métodos de *Runge-Kutta*, que permite determinar com um esforço computacional razoável, aproximações com a precisão desejada. O objetivo principal deste trabalho é apresentar uma outra classe de métodos denominados métodos *Pseudo Runge-Kutta*.

Tais métodos foram originariamente propostos por Byrne [6], e estudados por Rosen [21]. Uma formalização interessante de classes desses métodos foi dada por Byrne e Lambert [7].

Os métodos *Pseudo Runge-Kutta* não são de passo um, como os métodos de *Runge-Kutta*, e embora sendo de passo dois não pertencem à classe dos métodos lineares de passo múltiplo, mas apresentam algumas das características de métodos de cada uma dessas duas classes.

São métodos de passo dois, que consideram combinações das derivadas em pontos internos ao passo de integração, estando aí a grande semelhança entre eles e os métodos de *Runge-Kutta*.

Este trabalho está organizado em capítulos, sendo que no capítulo 1, apresentamos de forma resumida, os principais conceitos qualitativos e resultados, relacionados com a



classe dos métodos de *Runge-Kutta*, conforme proposto por Lambert [13], tomando tais conceitos e resultados como base para o desenvolvimento dos próximos capítulos.

Procuramos, então, desenvolver, nos capítulos 2, 3 e 4, os passos necessários para a obtenção das condições de ordem para algumas classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta* e estabelecer uma relação entre o número de estágios dos métodos e a ordem máxima alcançável. Em seguida, a partir das condições de ordem, construímos algumas famílias de métodos e, para cada uma delas, apresentamos alguns métodos particulares, que serão utilizados nas avaliações computacionais.

No capítulo 5 construímos, a partir dos métodos *Pseudo Runge-Kutta* propostos no capítulo 3, métodos *Pseudo Runge-Kutta* que permitam gerar aproximações para a solução exata em qualquer ponto interno ao intervalo de integração que se acabou de considerar. Tais aproximações podem ser obtidas sem qualquer necessidade de se avaliar novamente a derivada $f(x,y)$, o que computacionalmente se torna interessante.

Finalmente, no capítulo 6, apresentamos algumas avaliações computacionais comparando o desempenho dos métodos estudados ao longo deste trabalho.

A fim de tornarmos mais simples o entendimento da matéria exposta, procuramos desenvolver nosso trabalho da forma mais organizada e detalhada possível, com uma linguagem única para os diversos métodos estudados. Nosso objetivo é tornar mais claras e acessíveis as classes de métodos apresentadas aos que pretendam melhor conhecê-la ou utilizá-las, e também oferecer um ponto de partida àqueles que, porventura, pretendam aprofundar os estudos sobre os métodos *Pseudo Runge-Kutta*.



CAPÍTULO 1

MÉTODOS DE RUNGE-KUTTA

1.1 Introdução

Neste capítulo, introduziremos a classe dos métodos de *Runge-Kutta*, utilizados para a resolução numérica de problemas de valor inicial. Para essa classe de métodos, definiremos alguns conceitos básicos qualitativos, que, ajustados convenientemente, serão utilizados nos capítulos posteriores. Apresentaremos também para tais métodos, o processo utilizado para obtenção das condições de ordem para $r = 2, 3$ estágios utilizando algumas notações e convenções que permitirão simplificar a busca de resultados.



1.2 Métodos de Runge-Kutta

Consideremos uma equação diferencial ordinária de primeira ordem com uma condição inicial, definindo o que denominamos problema de valor inicial (p.v.i.), dado por :

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y), \\ y(x_0) &= y_0, \end{aligned} \tag{1.1}$$

para o qual, por hipótese, admitimos que a solução exata $y(x)$ existe de maneira única num intervalo $[a, b]$.

Vamos considerar uma discretização de $[a, b]$ numa malha de pontos x_n e passo h , isto é, $x_n = x_0 + nh$ para $n = 1, 2, \dots$, onde $x_0 = a$, e o parâmetro h é um número positivo identificado como o comprimento do passo de integração. Nos pontos dessa malha podemos calcular aproximações para $y(x)$ através de métodos numéricos, por exemplo, dos métodos de *Runge-Kutta*, que definiremos a seguir. Anotaremos por y_{n+1} a aproximação para a solução exata $y(x)$ de (1.1) em $x = x_{n+1}$.

Definição 1.1: Dado o p.v.i. (1.1), denominamos método de Runge-Kutta com r estágios e denotaremos por RK(r) ao método de passo um dado por :

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^r b_i k_i, \tag{1.2a}$$

$$k_i = f(x_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^r a_{ij} k_j), \tag{1.2b}$$

com $c_i = \sum_{j=1}^r a_{ij}$, $i = 1(1)r$, onde a_{ij} , c_i , b_i são valores constantes.

Podemos representar os coeficientes que caracterizam um método de *Runge-Kutta* com r estágios numa forma matricial, denominada matriz de Butcher, que apresentamos a seguir:



$$\begin{array}{c|cccc}
 c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1r} \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2r} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 c_r & a_{r1} & a_{r2} & \dots & a_{rr} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_r
 \end{array} \quad (1.3)$$

Se definirmos as matrizes $c = (c_1, c_2, \dots, c_r)'$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_r)'$ e $A = [a_{ij}]_{r \times r}$, a representação de Butcher para os coeficientes do método $RK(r)$ será dada por:

$$\begin{array}{c|c}
 c & A \\
 \hline
 & b'
 \end{array}$$

Em função da forma da matriz A , podemos dividir a classe dos métodos de *Runge-Kutta* em 3 subclasses de métodos: explícitos, semi-implícitos e implícitos.

Dizemos que um método de *Runge-Kutta* é :

- *Explícito* se a matriz A é estritamente triangular inferior.
- *Semi-implícito* se a matriz A é triangular inferior com algum $a_{ii} \neq 0$.
- *Implícito* se a matriz A é não triangular inferior, isto é, $a_{ij} \neq 0$ para algum $j > i$.

Observe que neste caso devemos, para determinar os k_i 's, resolver um ou mais sistemas de equações (dependendo da estrutura da matriz A) que poderão ser não lineares.

Neste trabalho vamos considerar somente a classe dos métodos de *Runge-Kutta* explícitos.

1.3 Conceitos qualitativos

Definição 1.2: Denominamos *Erro de truncamento local* de um Método de *Runge-Kutta* com r estágios no ponto $x = x_n$ e denotaremos por T_{n+1} , ao valor dado por:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - (y(x_n) + h \sum_{i=1}^r b_i k_i), \quad (1.4)$$

onde os valores k_i 's são definidos por (1.2b), mas considerando-se a solução exata $y(x)$ em lugar de y_n .



Admitindo que, para $x = x_n$ se verifica a hipótese local $y_n = y(x_n)$, vamos denotar então, a aproximação gerada através de (1.2a) por $\tilde{y}_{n+1}$. Isto é :

$$\tilde{y}_{n+1} = y(x_n) + h \sum_{i=1}^r b_i k_i.$$

Logo, sob essa hipótese local, temos que:

$$T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1}. \quad (1.5)$$

Portanto, quando por hipótese admitimos que $y_n = y(x_n)$, o Erro de truncamento local nada mais é do que a diferença entre a solução exata e a solução numérica no ponto x_{n+1} . Neste caso, denominaremos o Erro de truncamento local simplesmente de Erro local.

Considerando em (1.5) o desenvolvimento das funções em série de Taylor na vizinhança de $x = x_n$, podemos expressar T_{n+1} em potências de h como:

$$T_{n+1} = U_1 h + U_2 h^2 + U_3 h^3 + \dots + U_{p+1} h^{p+1} + \dots \quad (1.6)$$

Definição 1.3: Dizemos que um Método de Runge-Kutta tem ordem de consistência p se este for o maior inteiro positivo tal que:

$$T_{n+1} = O(h^{p+1}), \quad (1.7)$$

ou seja, $U_1 = U_2 = U_3 = \dots = U_p = 0$.

É importante registrar que os U_i 's de (1.6) são constituídos por expressões que envolvem os coeficientes do método multiplicadas por derivadas parciais da função $f(x, y)$. Logo, para que tenhamos $U_i = 0$ para $i = 1(1)p$, é preciso que as expressões que envolvem os coeficientes do método sejam nulas. Essa imposição vai gerar equações, denominadas "Condições de Ordem", as quais os coeficientes de um método de Runge-Kutta com r estágios devem satisfazer para que este tenha ordem de consistência p . No que segue, diremos simplesmente que o método tem ordem p .

A obtenção das condições de ordem tem uma complexidade que cresce com a ordem desejada para o método, em função das derivadas parciais da $f(x, y)$ envolvidas nas expressões U_i , $i = 1(1)p$.

1.4 As condições de ordem

A seguir, procurando ilustrar esse procedimento, vamos introduzir as convenções utilizadas por Lambert [13] para representar as derivadas parciais e algumas expressões que as envolvem.

Sejam:

$$\begin{aligned} f &= f(x, y), & f_x &= \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}, \\ f_y &= \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}, & f_{xx} &= \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2}, \\ f_{xy} &= \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y}, & f_{xy} (\equiv f_{yx}) &= \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y}, \quad \text{etc.} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Usando repetidas vezes a “regra da cadeia” e utilizando (1.8), podemos expressar as derivadas de $y(x)$ a partir da equação diferencial (1.1) obtendo:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y), \\ y''(x) &= f_x(x, y) + f_y(x, y)y'(x) = f_x + ff_y, \\ y'''(x) &= f_{xx} + y'f_{xy} + ff_{yx} + f_y'f_{yy} + f_y f_x + f_y f_y y' \\ &= f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2 f_{yy} + f_y f_x + ff_y^2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.9)$$

A fim de simplificar as expressões para as derivadas obtidas em (1.9), vamos considerar as seguintes convenções:

$$F = f_x + ff_y, \quad (1.10a)$$

$$S = ff_{yy} + f_{xy}, \quad (1.10b)$$

$$G = f_{xy} + 2ff_{xy} + f^2 f_{yy}, \quad (1.10c)$$

$$Q = f^2 f_y^2 + 2ff_x f_y + f_x^2, \quad (1.10d)$$

$$I = f_{yxx} + 3ff_{xyy} + 3f^2 f_{xyy} + f^3 f_{yyy}, \quad (1.10e)$$

$$S_2 = 6f_{xxy} + 6f^2 f_{yy} + 3f_x f_{yy} + 2ff_{xyy}, \quad (1.10f)$$

$$R = f^4 f_{yyy} + 4f^3 f_{xyy} + 6f^2 f_{xxy} + 4ff_{xxx} + f_{xxx}, \quad (1.10g)$$

Considerando (1.10), podemos expressar (1.9) agora como:

$$\begin{aligned}
 y'(x) &= f, \\
 y''(x) &= F, \\
 y'''(x) &= G + Ff_y, \\
 y^{(4)}(x) &= I + Gf_y + Ff_y^2 + 3Fff_{yy} + 3Ff_{xy}, \\
 y^{(5)}(x) &= R + Gf_y^2 + 4GS + 7FSf_y + If_y + Ff_y^3 + 6FS_2 + 3Qf_{yy}.
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Considerando que o desenvolvimento de $y(x_{n+1})$ em série de Taylor numa vizinhança de $x = x_n$, nos fornece:

$$\begin{aligned}
 y(x_{n+1}) &= y(x_n) + h y'(x_n) + \frac{h^2}{2!} y''(x_n) + \frac{h^3}{3!} y'''(x_n) \\
 &\quad + \frac{h^4}{4!} y^{(4)}(x_n) + \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(x_n) + O(h^6),
 \end{aligned}$$

usando (1.11) ele pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 y(x_{n+1}) &= y(x_n) + hf + \frac{h^2}{2!} F + \frac{h^3}{3!} (Ff_y + G) \\
 &\quad + \frac{h^4}{4!} (I + Gf_y + Ff_y^2 + 3Fff_{yy} + 3Ff_{xy}) \\
 &\quad + \frac{h^5}{5!} (R + Gf_y^2 + 4GS + 7FSf_y + If_y + Ff_y^3 + 6FS_2 + 3Qf_{yy}) + O(h^6).
 \end{aligned} \tag{1.12}$$

Por outro lado, podemos através dessa notação considerar também o desenvolvimento em série de Taylor de $\tilde{y}_{n+1}$. Daí, substituindo-o juntamente com (1.12) em (1.5) e considerando (1.6), geramos então as condições para que um RK(r) tenha ordem p , isto é, suas condições de ordem.

1.5 Algumas família de RK(r)

Ilustrando, para que um método de Runge-Kutta explícito com 2 estágios tenha ordem 2, devemos impor nulas as equações que multiplicam as potências de h e h^2 que aparecem em (1.7), logo as seguintes condições devem ser satisfeitas:

$$b_1 + b_2 = 1, \tag{1.13a}$$



$$b_2 c_2 = \frac{1}{2}. \quad (1.13b)$$

Uma família de métodos $RK(2)$ com ordem $p=2$, é obtida resolvendo-se o sistema formado pelas condições de ordem (1.13). Nesse caso, um dos coeficientes pode ser considerado como um parâmetro livre, pois temos duas equações e três incógnitas. Considerando c_2 como tal parâmetro obtemos a família:

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ c_2 & c_2 \\ \hline & \frac{2c_2-1}{2c_2} \quad \frac{1}{2c_2} \end{array} \quad (1.14)$$

com $c_2 \neq 0$.

Assim em (1.14) obtivemos uma família de métodos $RK(2)$ com ordem 2 onde, para cada escolha de c_2 , geramos um particular método.

Se tomarmos $c_2 = \frac{1}{2}$, obtemos:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$$

É importante registrar, e facilmente observável do desenvolvimento acima, que não é possível obter métodos com ordem $p = 2$ se considerarmos $r < 2$.

Considerando agora $r = 3$, para que o método tenha ordem 3 devemos impor nulas as equações que multiplicam as potências de h , h^2 e h^3 , logo as seguintes condições devem ser satisfeitas:

$$b_1 + b_2 + b_3 = 1, \quad (1.15a)$$

$$b_2 c_2 = \frac{1}{2}. \quad (1.13b)$$

Uma família de métodos $RK(2)$ com ordem $p=2$, é obtida resolvendo-se o sistema formado pelas condições de ordem (1.13). Nesse caso, um dos coeficientes pode ser considerado como um parâmetro livre, pois temos duas equações e três incógnitas. Considerando c_2 como tal parâmetro obtemos a família:

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ c_2 & c_2 \\ \hline & \frac{2c_2 - 1}{2c_2} \quad \frac{1}{2c_2} \end{array} \quad (1.14)$$

com $c_2 \neq 0$.

Assim em (1.14) obtivemos uma família de métodos $RK(2)$ com ordem 2 onde, para cada escolha de c_2 , geramos um particular método.

Se tomarmos $c_2 = \frac{1}{2}$, obtemos:

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 0 \quad 1 \end{array}$$

É importante registrar, e facilmente observável do desenvolvimento acima, que não é possível obter métodos com ordem $p = 2$ se considerarmos $r < 2$.

Considerando agora $r = 3$, para que o método tenha ordem 3 devemos impor nulas as equações que multiplicam as potências de h , h^2 e h^3 , logo as seguintes condições devem ser satisfeitas:

$$b_1 + b_2 + b_3 = 1, \quad (1.15a)$$

$$b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{1}{2}, \quad (1.15b)$$

$$b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{1}{3}, \quad (1.15c)$$

$$b_3 c_2 a_{32} = \frac{1}{6}. \quad (1.15d)$$

Analogamente, podemos construir uma família de métodos para $RK(3)$, com c_2 e c_3 como parâmetros livres, dada por:

0	0	
c_2	c_2	
c_3	$c_3 - a_{32}$	$\frac{(c_2 - c_3)c_3}{c_2(-2 + 3c_2)}$
	$\frac{2 - 3c_2 - 3c_3 + 6c_2c_3}{6c_2c_3}$	$\frac{2 - 3c_3}{6c_2(c_2 - c_3)}$
	$\frac{-2 + 3c_2}{6(c_2 - c_3)c_3}$	

Se fizermos $c_2 = \frac{1}{3}$ e $c_3 = \frac{2}{3}$ encontramos o método:

0	0	
$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	
$\frac{2}{3}$	0	$\frac{1}{3}$
	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$

(1.16)

Como no caso anterior, podemos também observar que o número mínimo de estágios para ordem $p = 3$ será $r = 3$.

No caso $p = 4$, o número mínimo de estágios será $r = 4$, quando teríamos que resolver um sistema de 8 equações, obtendo-se então a família dos métodos de *Runge-Kutta* com $r = p = 4$.

Um particular método dessa família, e que é bastante utilizado, tem como matriz de Butcher:

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
 \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
 1 & 0 & 0 & 1 & \\
 \hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array} \quad (1.17)$$

No caso $p = 5$, o número mínimo de estágios será $r = 6$ e teremos um sistema com 17 equações. Como ilustração, vamos considerar o seguinte caso particular, que será utilizado no capítulo 6 em avaliações computacionais:

$$\begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & \\
 \frac{2}{5} & \frac{2}{5} & & & & \\
 \frac{1}{4} & \frac{11}{64} & \frac{5}{64} & & & \\
 \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & & \\
 \frac{3}{4} & \frac{3}{64} & \frac{-15}{64} & \frac{9}{16} & & \\
 1 & 0 & \frac{5}{7} & \frac{6}{7} & \frac{-12}{7} & \frac{8}{7} \\
 \hline
 & \frac{7}{90} & 0 & \frac{32}{90} & \frac{12}{90} & \frac{32}{90} & \frac{7}{90}
 \end{array} \quad (1.18)$$

Dos desenvolvimentos até aqui apresentados, podemos observar que existe uma relação entre o número de estágios e ordem máxima alcançável, dada por $p = r$ para $r = 1, 2, 3$ e 4. Para $r > 4$, essa identificação não se verifica, conforme constatamos em [13] Lambert, apresenta:

ordem máxima alcançável	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
número mínimo de estágios	1	2	3	4	6	7	9	11	$12 \leq r \leq 17$	$13 \leq r \leq 17$



CAPÍTULO 2

MÉTODOS PSEUDO RUNGE-KUTTA DE PASSO 2

2.1 Introdução

Neste capítulo introduziremos uma classe de métodos, propostos por Byrne e Lambert em [7], que, por considerarem uma combinação linear de aproximações para a derivada do problema, semelhante à classe dos métodos de *Runge-Kutta*, mas utilizando não apenas a aproximação para a solução obtida no último ponto de integração, mas também a do ponto anterior são denominados métodos *Pseudo Runge-Kutta* de passo 2.

Para essa classe de métodos, desenvolveremos os passos necessários para a obtenção das condições de ordem, considerando $r = 2, 3, 4$ estágios e analisaremos qual a ordem máxima alcançável em função do número de estágios considerado. Finalmente, apresentaremos algumas famílias de tais métodos, por nós obtidas.



2.2 Métodos Pseudo Runge-Kutta de passo 2

Conforme Byrne e Lambert [7], consideremos a classe de métodos, denominados métodos *Pseudo Runge-Kutta* de passo 2 com r estágios, que vamos denotar por $PRK2(r)$, definidos por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^r b_j k_j + h \sum_{j=1}^r \bar{b}_j \bar{k}_j, \tag{2.1a}$$

com:

$$k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}),$$

$$k_j = f(x_{n-1} + c_j h, y_{n-1} + h \sum_{m=1}^{j-1} a_{jm} k_m), \tag{2.1b}$$

$$\bar{k}_1 = f(x_n, y_n),$$

$$\bar{k}_j = f(x_n + c_j h, y_n + h \sum_{m=1}^{j-1} a_{jm} \bar{k}_m), \quad j=2(1)r,$$

onde, para $i=1(1)r$ $c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}$ e $-1 < c_i \leq 1$. (2.1c)

Métodos dessa classe são caracterizados através dos coeficientes c_j , a_{jm} , b_j , $\bar{b}_j$. Assim, de maneira semelhante à matriz de Butcher dos métodos de *Runge-Kutta*, vamos considerar uma representação para os coeficientes que definem um método de (2.1), através de uma tabela matricial, dada por:

0	0				
c_2	a_{21}				
c_3	a_{31}	a_{32}			
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$			
c_r	a_{r1}	a_{r2}	$\dots$	$a_{r,r-1}$	
	b_1	b_2	$\dots$	b_{r-1}	b_r
	$\bar{b}_1$	$\bar{b}_2$	$\dots$	$\bar{b}_{r-1}$	$\bar{b}_r$

(2.2)



2.3 As condições de ordem para métodos PRK2(2)

De maneira análoga à considerada para a classe dos métodos $RK(r)$, vamos determinar as condições para que um método definido por (2.1) tenha ordem p e analisar qual o maior valor assumível por p em função do número de estágios do método.

De (1.5) e (1.6), temos que se o método tem ordem p , então $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} = O(h^{p+1})$, agora sob a hipótese local $y(x_{n+j}) = y_{n+j}$ para $j = -1, 0$. Assim, considerando os desenvolvimentos em série de Taylor de $y(x_{n+1})$ e $\tilde{y}_{n+1}$, numa vizinhança de $x = x_n$, podemos construir as condições de ordem para essa classe de métodos através de T_{n+1} .

Vamos inicialmente construir as condições de ordem para os métodos da classe definida em (2.1) quando consideramos $r = 2$ e que podem ser escritos como:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2) + h(\bar{b}_1 \bar{k}_1 + \bar{b}_2 \bar{k}_2), \\ k_1 &= f(x_{n-1}, y_{n-1}), \\ k_2 &= f(x_{n-1} + c_2 h, y_{n-1} + h a_{21} k_1), \\ \bar{k}_1 &= f(x_n, y_n), \\ \bar{k}_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + h c_2 \bar{k}_1). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Nesse caso, como $a_{21} = c_2$, sua representação na forma (2.2) será:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 \\ c_2 & c_2 \\ \hline & b_1 & b_2 \\ & \bar{b}_1 & \bar{b}_2 \end{array} \quad (2.4)$$

Desenvolvendo $y(x_{n+1})$, k_1 , k_2 , e $\bar{k}_2$ em série de potência, na vizinhança de $x = x_n$ e utilizando as notações apresentadas em (1.10) e (1.11) encontramos :



$$y(x_{n-1}) = y(x_n) - hf + \frac{h^2}{2}F - \frac{h^3}{6}(Ff_y + G) + \frac{h^4}{24}(I + Gf_y + Ff_y^2 + 3FS) \\ - \frac{h^5}{120}(R + Gf_y^2 + 4GS + 7FSf_y + If_y + Ff_y^3 + 6FS_2 + 3Qf_{yy}) + O(h^6),$$

$$k_1 = f - hF + \frac{h^2}{2}(Ff_y + G) - \frac{h^3}{6}(I + Gf_y + Ff_y^2 + 3FS) \\ + \frac{h^4}{24}(R + Gf_y^2 + 4GS + 7FSf_y + If_y + Ff_y^3 + 6FS_2 + 3Qf_{yy}) + O(h^5),$$

$$k_2 = f + h(c_2 - 1)F + \frac{h^2}{2}[(1 - 2c_2 + c_2^2)G + (1 - 2c_2)Ff_y] \\ + \frac{h^3}{6}[(-1 + 3c_2 - 3c_2^2 + c_2^3)I + (-1 + 3c_2 - 2c_2^2)3FS + (3c_2 - 1)(Ff_y^2 + Gf_y)] \\ + \frac{h^4}{24}[(1 - 4c_2 + 6c_2^2 - 4c_2^3 + c_2^4)R + (1 - 4c_2)(Gf_y^2 + If_y + Ff_y^3 + 3FSf_y) \\ + (1 - 4c_2 + 3c_2^2)(4GS + 4FSf_y) + (1 - 4c_2 + 4c_2^2)3Qf_{yy} \\ + (1 - 4c_2 + 5c_2^2 - 2c_2^3)6FS_2] + O(h^5),$$

$$\bar{k}_2 = f + hc_2F + \frac{h^2}{2}(c_2^2)G + \frac{h^3}{6}(c_2^3)I + \frac{h^4}{24}(c_2^4)R + O(h^5).$$

Considerando que: $\tilde{y}_{n+1} = y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2) + h(\bar{b}_1\bar{k}_1 + \bar{b}_2\bar{k}_2)$, isto é, (2.3) sob as hipóteses locais $y_{n-1} = y(x_{n-1})$ e $y_n = y(x_n)$, e substituindo $y(x_{n+1})$ e $\tilde{y}_{n+1}$ em $T_{n+1} = y(x_{n+1}) - \tilde{y}_{n+1} = O(h^{p+1})$, encontramos:

$$T_{n+1} = h[[(b_1 + b_2 + \bar{b}_1 + \bar{b}_2) - 1]f] + h^2[(-b_1 - b_2 + b_2c_2 + \bar{b}_2c_2 - \frac{1}{2})F] \\ + h^3[(b_1 + b_2 - 2b_2c_2 + b_2c_2^2 + c_2^2\bar{b}_2 - \frac{1}{3})G + (b_1 + b_2 - 2c_2b_2 - \frac{1}{3})Ff_y] \\ + h^4[(-b_1 - b_2 + 3c_2b_2 - 3c_2^2b_2 + c_2^3b_2 + c_2^3\bar{b}_2 - \frac{1}{4})I \\ + (-b_1 - b_2 + 3b_2c_2 - \frac{1}{4})(Ff_y^2 + Gf_y) \\ + (-b_1 - b_2 + 3c_2b_2 - 2c_2^2b_2 - \frac{1}{4})(3FS)] + O(h^5). \quad (2.5)$$

De (2.5) podemos concluir que o *PRK2* (2) definido por (2.3) terá ordem $p = 2$ se estiverem satisfeitas as condições:

$$b_1 + b_2 + \bar{b}_1 + \bar{b}_2 = 1, \quad (2.6a)$$

$$-b_1 - b_2 + b_2 c_2 + \bar{b}_2 c_2 = \frac{1}{2}. \quad (2.6b)$$

Ainda por (2.5), concluímos que o método terá ordem 3 se, além de (2.6) estiverem satisfeitas as seguintes condições:

$$b_1 + b_2 - 2b_2 c_2 + b_2 c_2^2 + \bar{b}_2 c_2^2 = \frac{1}{3}, \quad (2.7a)$$

$$b_1 + b_2 - 2b_2 c_2 = \frac{1}{3}, \quad (2.7b)$$

Portanto, temos em (2.6) e (2.7) um sistema com 4 equações a 5 incógnitas, que devem ser satisfeitas para que o método tenha ordem 3. Isto é, são as “condições de ordem” para os *PRK2* (2) definidos por (2.1) e com ordem 3.

Resolvendo o sistema, podemos determinar uma família a um parâmetro de tais métodos.

Considerando as equações de (2.7), obtemos que $(b_2 + \bar{b}_2)c_2^2 = 0$. Logo:

$$\bar{b}_2 = -b_2, \quad (2.8a)$$

ou

$$c_2 = 0. \quad (2.8b)$$

Primeiro Caso: Considerando a hipótese (2.8a) e substituindo no sistema (2.6) e (2.7) temos:

$$b_1 + \bar{b}_1 = 1, \quad (2.9a)$$

$$b_1 + b_2 = \frac{-1}{2}, \quad (2.9b)$$

$$b_1 + b_2 - 2b_2 c_2 = \frac{1}{3}. \quad (2.9c)$$

De (2.9b) e (2.9c) obtemos:



$$b_2 = \frac{-5}{12c_2}, \quad c_2 \neq 0,$$

$$b_1 = \frac{5-6c_2}{12c_2}.$$

De (2.9a) obtemos:

$$\bar{b}_1 = \frac{18c_2 - 5}{12c_2}.$$

Portanto, encontramos uma família de métodos $PRK2(2)$ com ordem 3, tendo $c_2 \neq 0$ como um parâmetro livre que na representação (2.2), é dada por:

0	0	
c_2	c_2	
	$\frac{5-6c_2}{12c_2}$	$\frac{-5}{12c_2}$
	$\frac{18c_2-5}{12c_2}$	$\frac{5}{12c_2}$

(2.10)

ou, na forma (2.3):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12c_2} [(5-6c_2)k_1 - 5k_2 + (18c_2-5)\bar{k}_1 + 5\bar{k}_2].$$

Segundo caso: Considerando a hipótese (2.8b), isto é, $c_2 = 0$, concluímos que o método (2.3) terá apenas 1 estágio, logo descartamos esta possibilidade, pois estamos interessados em determinar a ordem máxima alcançável para métodos com $r = 2$.

Vamos agora analisar se é possível alcançar uma ordem a mais para métodos definidos por (2.3), ou seja, analisar a existência ou não de tais métodos com ordem $p = 4$.

Para que isso aconteça, além (2.6) e (2.7), por (2.5), temos que também devem ser satisfeitas as condições:

$$-b_1 - b_2 + 3b_2c_2 = \frac{1}{4}, \quad (2.11a)$$

$$-b_1 - b_2 + 3b_2c_2 - 3b_2c_2^2 = \frac{1}{4}, \quad (2.11b)$$

$$-b_1 - b_2 + 3b_2c_2 - 2b_2c_2^2 = \frac{1}{4}. \quad (2.11c)$$

Subtraindo (2.11b) de (2.11c) obtemos :

$$b_2c_2^2 = 0. \quad (2.12)$$

Logo, devemos ter $b_2 = 0$ ou $c_2 = 0$.

Considerando tanto $b_2 = 0$ como $c_2 = 0$, o sistema formado pelas equações de (2.6), (2.7) e (2.11) não terá solução. Portanto, concluímos não existir nenhum PRK2 (2) com ordem quatro, confirmando um resultado apresentado por Nakashima (1987) em [17].

2.4 As condições de ordem para métodos PRK2(3)

Considerando agora a classe de métodos definidos por (2.1) com $r = 3$ temos:

$$y_{n+1} = y_n + h(b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3) + h(\bar{b}_1\bar{k}_1 + \bar{b}_2\bar{k}_2 + \bar{b}_3\bar{k}_3),$$

$$k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}),$$

$$k_2 = f(x_{n-1} + c_2h, y_{n-1} + ha_{21}k_1),$$

$$k_3 = f(x_{n-1} + c_3h, y_{n-1} + ha_{31}k_1 + ha_{32}k_2), \quad (2.13)$$

$$\bar{k}_1 = f(x_n, y_n),$$

$$\bar{k}_2 = f(x_n + c_2h, y_n + ha_{21}\bar{k}_1),$$

$$\bar{k}_3 = f(x_n + c_3h, y_n + ha_{31}\bar{k}_1 + ha_{32}\bar{k}_2).$$

Como no parágrafo anterior, para investigarmos qual a maior ordem alcançável para métodos definidos por (2.13), estabeleceremos as condições de ordem necessárias.

Para isso, além dos desenvolvimentos de k_1 , k_2 , $\bar{k}_2$, já apresentados ajustados para $r = 3$, devemos também considerar os de k_3 e $\bar{k}_3$. Expandindo k_3 e $\bar{k}_3$ em série de potência na vizinhança de x_n obtemos:

$$\begin{aligned} k_3 = & f + h(c_3 - 1)F + \frac{h^2}{2} [(1 - 2c_3 + c_3^2)G + (1 - 2c_3 + 2a_{32}c_2)Ff_y] \\ & + \frac{h^3}{6} [(-1 + 3c_3 - 3c_3^2 + c_3^3)I + (-1 + 3c_3 - 6a_{32}c_2)Ff_y^2 \\ & + (-1 + 3c_3 - 2c_3^2 + 2a_{32}c_2c_3 - \frac{1}{3}a_{32}c_2^2)3FS + (-1 + 3c_3 - 6a_{32}c_2 + 3a_{32}c_2^2)Gf_y] \\ & + \frac{h^4}{24} [(1 - 4c_3 + 6c_3^2 - 4c_3^3 + c_3^4)R + (1 - 4c_3 + 12a_{32}c_2 - 12a_{32}c_2^2 + 4a_{32}c_2^3)If_y \\ & + (1 - 4c_3 + 12a_{32}c_2)(Gf_y^2 + Ff_y^3) + (1 - 4c_3 + 12a_{32}c_2 - 8a_{32}c_2^2)(3FSf_y) \\ & + (1 - 4c_3 + 4c_3^2 - 8a_{32}c_2c_3 + 4a_{32}c_2^2 + 4a_{32}^2c_2^2)3Qf_{yy} \\ & + (1 - 4c_3 + 3c_3^2 - 6a_{32}c_2c_3 - 3a_{32}c_2^2 + 3a_{32}c_2^2c_3 + 6a_{32}c_2^2c_3^2)4GS \\ & + (1 - 4c_3 + 5c_3^2 - 2c_3^3 + 2a_{32}c_2 - 4a_{32}c_2c_3 + 2a_{32}c_2^2c_3^2)6FS_2 \\ & + (1 - 4c_3 + 3c_3^2 + 6a_{32}c_2 - 6a_{32}c_2c_3)4FSf_y + O(h^5), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{k}_3 = & f + c_3hF + \frac{h^2}{2}(c_3^2G + 2a_{32}c_2Ff_y) + \frac{h^3}{6}[c_3^3I + 3a_{32}c_2^2Gf_y + (2a_{32}c_2c_3)3FS] \\ & + \frac{h^4}{24}[c_3^4R + (4a_{32}c_2^3)If_y + (3a_{32}c_2^2c_3)4GS + (4a_{32}^2c_2^2)3Qf_{yy} + (2a_{32}c_2c_3^2)6FS_2] + O(h^5). \end{aligned}$$

Através de um procedimento análogo ao considerado anteriormente, vamos obter as condições de ordem, a partir do desenvolvimento em série de potência na vizinhança do ponto x_n da expressão de T_{n+1} , considerando-se nulas as expressões envolvendo os coeficientes do método e que multiplicam potências de h até h^3 . Tendo, então, que $T_{n+1} = O(h^4)$, obtemos as seguintes condições de ordem, para que os métodos definidos por (2.13) tenham ordem 3.

$$b_1 + b_2 + b_3 + \bar{b}_1 + \bar{b}_2 + \bar{b}_3 = 1, \quad (2.14a)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + (b_2c_2 + b_3c_3) + (\bar{b}_2c_2 + \bar{b}_3c_3) = \frac{1}{2}, \quad (2.14b)$$

$$(b_1+b_2+b_3) - 2(b_2c_2+b_3c_3) + (b_2c_2^2+b_3c_3^2) + (\bar{b}_2c_2^2+\bar{b}_3c_3^2) = \frac{1}{3}, \quad (2.14c)$$

$$(b_1+b_2+b_3) - 2(b_2c_2+b_3c_3) + 2(a_{32}b_3c_2+a_{32}\bar{b}_3c_2) = \frac{1}{3}. \quad (2.14d)$$

Para que o método (2.13) tenha ordem 4, além de (2.14), devem ser satisfeitas também as seguintes condições:

$$-(b_1+b_2+b_3) + 3(b_2c_2+b_3c_3) - 6a_{32}b_3c_2 = \frac{1}{4}, \quad (2.15a)$$

$$-(b_1+b_2+b_3) + 3(b_2c_2+b_3c_3) + 3(a_{32}b_3c_2^2+a_{32}\bar{b}_3c_2^2) - 6a_{32}b_3c_2 = \frac{1}{4}, \quad (2.15b)$$

$$-(b_1+b_2+b_3) + 3(b_2c_2+b_3c_3) - 3(b_2c_2^2+b_3c_3^2) + (b_2c_2^3+b_3c_3^3) + (\bar{b}_2c_2^3+\bar{b}_3c_3^3) = \frac{1}{4}, \quad (2.15c)$$

$$-(b_1+b_2+b_3) + 3(b_2c_2+b_3c_3) - 2(b_2c_2^2+b_3c_3^2) - 2a_{32}b_3c_2 + 2(a_{32}b_3c_2c_3+a_{32}\bar{b}_3c_2c_3) = \frac{1}{4}. \quad (2.15d)$$

Considerando o sistema (2.14) e (2.15), vamos procurar determinar uma família de métodos (2.13) com ordem quatro.

Das equações (2.15a) e (2.15b), obtemos que $a_{32}c_2^2(b_3+\bar{b}_3) = 0$, logo devemos considerar :

$$\bar{b}_3 = -b_3, \quad (2.16a)$$

ou

$$a_{32}c_2^2 = 0. \quad (2.16b)$$

Primeiro Caso: Considerando (2.16a) com $a_{32}c_2^2 \neq 0$, e substituindo em (2.14c) e (2.14d) obtemos:

$$c_2^2(b_2+\bar{b}_2) = 0,$$

logo, devemos considerar:

$$\bar{b}_2 = -b_2, \quad (2.17a)$$

ou

$$c_2 = 0. \quad (2.17b)$$

Tomando $c_2 = 0$, concluímos que as equações (2.14b), (2.14c) e (2.15a) não se verificam para nenhum valor de b_3 e c_3 . Portanto, não devemos considerar a hipótese $c_2 = 0$.

Agora, considerando (2.16a) e (2.17a) e substituindo nas equações de (2.14) e (2.15) obtemos o seguinte sistema:

$$b_1 + \bar{b}_1 = 1, \quad (2.18a)$$

$$b_1 + b_2 + b_3 = \frac{-1}{2}, \quad (2.18b)$$

$$(b_1 + b_2 + b_3) - 2(b_2 c_2 + b_3 c_3) = \frac{1}{3}, \quad (2.18c)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + 3(b_2 c_2 + b_3 c_3) - 6a_{32} b_3 c_2 = \frac{1}{4}, \quad (2.18d)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + 3(b_2 c_2 + b_3 c_3) - 3(b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2) = \frac{1}{4}, \quad (2.18e)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + 3(b_2 c_2 + b_3 c_3) - 2(b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2) - 2a_{32} b_3 c_2 = \frac{1}{4}, \quad (2.18f)$$

Se substituirmos (2.18b) em (2.18c) obtemos,

$$b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{-5}{12}. \quad (2.19)$$

Daí, substituindo (2.18b) e (2.19) em (2.18d) e (2.18e) obtemos,

$$a_{32} b_3 c_2 = \frac{-1}{6}, \quad (2.20a)$$

$$b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = \frac{-1}{3}. \quad (2.20b)$$

Ainda, observamos que (2.18f) pode ser escrita como uma combinação linear das equações (2.18b), (2.19) e (2.20). Resumindo, para gerarmos métodos dessa classe com ordem $p = 4$ devemos considerar as equações: (2.18a), (2.18b), (2.19), (2.20a), (2.20b). Isto é, ficamos com um sistema constituído por 5 equações a 7 incógnitas. Resolvendo ao novo sistema determinamos uma família de métodos a dois parâmetros livres, com as restrições $c_2 c_3 \neq 0$, $a_{32} \neq 0$, $c_2 \neq c_3$ e $c_2 \neq \frac{4}{5}$, dada por:

$$\bar{b}_1 = \frac{4 - 5c_2 - 5c_3 + 18c_2c_3}{12c_2c_3},$$

$$b_1 = \frac{-4 + 5c_2 + 5c_3 - 6c_2c_3}{12c_2c_3},$$

$$\bar{b}_2 = \frac{-4 + 5c_3}{12c_2(-c_2 + c_3)},$$

$$b_2 = \frac{4 - 5c_3}{12c_2(-c_2 + c_3)}, \quad (2.21)$$

$$\bar{b}_3 = \frac{-4 + 5c_2}{12c_3(c_2 - c_3)}$$

$$b_3 = \frac{4 - 5c_2}{12c_3(c_2 - c_3)},$$

$$a_{31} = c_3 - a_{32},$$

$$a_{32} = \frac{2c_3(-c_2 + c_3)}{4c_2 - 5c_2^2}.$$

Segundo Caso: Considerando agora a possibilidade de (2.16b) acontecer, com $a_{32} = 0$, pois $c_2 = 0$ reduz um estágio no método, o sistema formado pelas equações de (2.14) e (2.15), se reduz a:

$$(b_1 + b_2 + b_3) + \bar{b}_1 + \bar{b}_2 + \bar{b}_3 = 1, \quad (2.22a)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + (b_2c_2 + b_3c_3) + (\bar{b}_2c_2 + \bar{b}_3c_3) = \frac{1}{2}, \quad (2.22b)$$

$$(b_1 + b_2 + b_3) - 2(b_2c_2 + b_3c_3) + (b_2c_2^2 + b_3c_3^2) + (\bar{b}_2c_2^2 + \bar{b}_3c_3^2) = \frac{1}{3}, \quad (2.22c)$$

$$(b_1 + b_2 + b_3) - 2(b_2c_2 + b_3c_3) = \frac{1}{3}, \quad (2.22d)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + 3(b_2c_2 + b_3c_3) = \frac{1}{4}, \quad (2.22e)$$

$$\begin{aligned} & -(b_1 + b_2 + b_3) + 3(c_2b_2 + c_3b_3) - 3(b_2c_2^2 + b_3c_3^2) + (b_2c_2^3 + b_3c_3^3) \\ & + (\bar{b}_2c_2^3 + \bar{b}_3c_3^3) = \frac{1}{4}, \end{aligned} \quad (2.22f)$$

$$-(b_1 + b_2 + b_3) + 3(b_2c_2 + b_3c_3) - 2(b_2c_2^2 + b_3c_3^2) = \frac{1}{4} \quad (2.22g)$$

Das equações (2.22d) e (2.22e) temos que:

$$b_1 + b_2 + b_3 = \frac{3}{2}, \quad (2.23a)$$

$$b_2 c_2 + b_3 c_3 = \frac{7}{12}. \quad (2.23b)$$

Substituindo (2.23a) e (2.23b) em (2.22b) e (2.22g) obtemos:

$$\bar{b}_2 c_2 + \bar{b}_3 c_3 = \frac{17}{12}, \quad (2.24a)$$

$$b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 = 0. \quad (2.24b)$$

Por fim, tomando as equações (2.23) e (2.24) e substituindo em (2.22c) e (2.22f), ficamos com:

$$\bar{b}_2 c_2^2 + \bar{b}_3 c_3^2 = 0, \quad (2.25a)$$

$$b_2 c_2^3 + b_3 c_3^3 + \bar{b}_2 c_2^3 + \bar{b}_3 c_3^3 = 0. \quad (2.25b)$$

Logo, o sistema resultante é formado pelas seguintes equações (2.22a), (2.23), (2.24) e (2.25).

Das equações (2.23b) e (2.24a) obtemos os valores de b_2 e b_3 , e das equações (2.24b) e (2.25a) determinamos os valores de $\bar{b}_2$ e $\bar{b}_3$, obtendo:

$$b_2 = \frac{7c_3}{12c_2(c_3 - c_2)}, \quad b_3 = \frac{7c_2}{12c_3(c_2 - c_3)},$$

$$\bar{b}_2 = \frac{17c_3}{12c_2(c_3 - c_2)}, \quad \bar{b}_3 = \frac{17c_2}{12c_3(c_2 - c_3)},$$

com $c_2 \neq 0$, $c_3 \neq 0$ e $c_3 \neq c_2$.

Substituindo então b_2 , $\bar{b}_2$, b_3 e $\bar{b}_3$, já determinados, em (2.25b) chegamos que:

$$c_2 c_3 = 0.$$

O que contraria à hipótese $c_2 \neq 0$ e $c_3 \neq 0$. Portanto, concluímos que a_{32} não pode assumir o valor zero.

2.5 As condições de ordem para o método PRK 2(4)

Construiremos, por fim, as condições de ordem e analisaremos qual a ordem máxima alcançável para a classe de métodos definidos por (2.1), para $r = 4$, isto é, definidos por:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^4 b_j k_j + h \sum_{j=1}^4 \bar{b}_j \bar{k}_j, \quad (2.26a)$$

$$k_j = f(x_{n-1}, y_{n-1}),$$

$$k_j = f(x_{n-1} + c_j h, y_{n-1} + h \sum_{m=1}^{j-1} a_{jm} k_m), \quad (2.26b)$$

$$\bar{k}_j = f(x_n, y_n),$$

$$\bar{k}_j = f(x_n + c_j h, y_n + h \sum_{m=1}^{j-1} a_{jm} \bar{k}_m), \quad j=2(1)4.$$

Para determinarmos as condições de ordem de (2.26), precisamos considerar as expansões em série de potência de k_4 e $\bar{k}_4$ na vizinhança do ponto x_n .

Então, com um procedimento análogo ao desenvolvido no parágrafo anterior, determinamos as condições de ordem para que o método (2.26) tenha ordem 4, dadas por:

$$\sum_{i=1}^4 (b_i + \bar{b}_i) = 1, \quad (2.27a)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 c_i (b_i + \bar{b}_i) = 1/2, \quad (2.27b)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 2 \sum_{i=2}^4 b_i c_i + 2 \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j (b_i + \bar{b}_i) = 1/3, \quad (2.27c)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-2b_i c_i + c_i^2 (b_i + \bar{b}_i)) = 1/3, \quad (2.27d)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (3b_i c_i - 3b_i c_i^2 + c_i^3 (b_i + \bar{b}_i)) = 1/4, \quad (2.27e)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + 3\sum_{i=2}^4 b_i c_i - 6\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j + 6a_{32} a_{43} c_2 (b_4 + \bar{b}_4) = 1/4, \quad (2.27f)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (3b_i c_i - 2b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (-2a_{ij} b_i c_j + 2a_{ij} c_j c_i (b_i + \bar{b}_i)) = 1/4, \quad (2.27g)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + 3\sum_{i=2}^4 b_i c_i + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (-6a_{ij} b_i c_j + 3a_{ij} c_j^2 (b_i + \bar{b}_i)) = 1/4, \quad (2.27h)$$

Para que o método de (2.26) alcance ordem cinco, além das equações acima devem também estar satisfeitas as seguintes condições:

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + 12\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j - 24a_{32} a_{43} b_4 c_2 = 1/5, \quad (2.28a)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (12a_{ij} b_i c_j - 8a_{ij} b_i c_j^2) \\ - 8a_{32} a_{43} c_2 (b_4 + c_3 (b_4 + \bar{b}_4)) = 1/5, \end{aligned} \quad (2.28b)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 3b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (6a_{ij} b_i c_j - 6a_{ij} b_i c_j c_i) \\ + 6a_{32} a_{43} c_2 (b_4 - c_4 (b_4 + \bar{b}_4)) = 1/5, \end{aligned} \quad (2.28c)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 5b_i c_i^2 - 2b_i c_i^3) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (2a_{ij} b_i c_j - 4a_{ij} b_i c_j c_i) \\ + 2a_{ij} c_j c_i^2 (b_i + \bar{b}_i) + 2a_{43} b_4 c_4^2 = 1/5, \end{aligned} \quad (2.28d)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + 12\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j + 12a_{32} a_{43} c_2^2 (b_4 + \bar{b}_4) - 24a_{32} a_{43} b_4 c_2 = 1/5, \quad (2.28e)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 3b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (6a_{ij} b_i c_j - 3a_{ij} b_i c_j^2 - 6a_{ij} b_i c_j c_i) \\ + 3\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^2 c_i (b_i + \bar{b}_i) = 1/5, \end{aligned} \quad (2.28f)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (12a_{ij} b_i c_j - 12a_{ij} b_i c_j^2 + 4a_{ij} c_j^3 (b_i + \bar{b}_i)) = 1/5, \quad (2.28g)$$



$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 4b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (4a_{ij} b_i c_j + 4a_{ij}^2 c_j^2 (b_i + \bar{b}_i) - 8a_{ij} b_i c_j c_i) + 8a_{42} a_{43} c_2 c_4 (b_4 + \bar{b}_4) = 1/5, \quad (2.28h)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 6b_i c_i^2 - 4b_i c_i^3 + b_i c_i^4 + \bar{b}_i c_i^4) = 1/5. \quad (2.28i)$$

Portanto, as equações do sistema composto por (2.27) e (2.28) constituem as condições de ordem, necessárias para que o método de (2.26) tenha ordem cinco. Resolvendo-se o sistema, podemos obter uma família de tais métodos, como veremos a seguir.

Das equações (2.28a) e (2.28e) obtemos:

$$a_{32} a_{43} c_2^2 (b_4 + \bar{b}_4) = 0.$$

Para a mesma classe de métodos com 2 e 3 estágios, constatamos que sempre que partimos da hipótese $b_3 + \bar{b}_3 = 0$, foi possível determinar uma família de tais métodos. Então, por analogia tomemos:

$$\bar{b}_4 = -b_4. \quad (2.29)$$

Considerando (2.29) as equações (2.27f) e (2.27h), fornecem:

$$a_{32} c_2^2 (b_3 + \bar{b}_3) = 0.$$

Dáí, por raciocínio análogo ao anterior, consideremos:

$$\bar{b}_3 = -b_3. \quad (2.30)$$

Por fim, considerando (2.29) e (2.30), nas equações de (2.27c) e (2.27d) e o mesmo raciocínio, tomemos:

$$\bar{b}_2 = -b_2. \quad (2.31)$$

Considerando (2.29), (2.30) e (2.31) o sistema inicialmente formado pelas 17 equações, agora se reduz a um com 14 equações, pois podemos excluir as equações (2.28e), (2.27h) e (2.27d). Logo o sistema resultante será dado por:

$$\bar{b}_1 + b_1 = 1, \quad (2.32a)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i = \frac{-1}{2}, \quad (2.32b)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 2 \sum_{i=2}^4 b_i c_i = \frac{1}{3}, \quad (2.32c)$$



$$-\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (3b_i c_i - 3b_i c_i^2) = \frac{1}{4}, \quad (2.32d)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + 3\sum_{i=2}^4 b_i c_i - 6\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j = \frac{1}{4}, \quad (2.32e)$$

$$-\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (3b_i c_i - 2b_i c_i^2) - 2\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j = \frac{1}{4}, \quad (2.32f)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + 12\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j - 24a_{32}a_{43}b_4c_2 = 1/5, \quad (2.32g)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (12a_{ij} b_i c_j - 8a_{ij} b_i c_j^2) - 8a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{5}, \quad (2.32h)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 3b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (6a_{ij} b_i c_j - 6a_{ij} b_i c_j c_i) - 6a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{5}, \quad (2.32i)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 5b_i c_i^2 - 2b_i c_i^3) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (2a_{ij} b_i c_j - 4a_{ij} b_i c_j c_i) + \\ + 2(a_{32}b_4c_4^2 + a_{43}b_4c_3c_4^2) = \frac{1}{5}, \end{aligned} \quad (2.32j)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 3b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (6a_{ij} b_i c_j c_i - 3a_{ij} b_i c_j^2 - 6a_{ij} b_i c_j c_i) = \frac{1}{5}, \quad (2.32l)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i - 4\sum_{i=2}^4 b_i c_i + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (12a_{ij} b_i c_j - 12a_{ij} b_i c_j^2) = \frac{1}{5}, \quad (2.32m)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 4b_i c_i^2) + \sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} (4a_{ij} b_i c_j - 8a_{ij} b_i c_j c_i) = \frac{1}{5}, \quad (2.32n)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i + \sum_{i=2}^4 (-4b_i c_i + 6b_i c_i^2 - 4b_i c_i^3) = \frac{1}{5}, \quad (2.32o)$$

Considerando agora no sistema (2.32) e o mesmo procedimento do parágrafo anterior, vamos procurar simplificá-lo.

Se substituirmos (2.32b) em (2.32c), obtemos:

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i = \frac{-5}{12}. \quad (2.33)$$



Substituindo (2.32b) e (2.33) em (2.32d) e (2.32e) obtemos:

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i^2 = \frac{-1}{3}, \quad (2.34a)$$

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j = \frac{-1}{6}. \quad (2.34b)$$

Substituindo agora (2.32b), (2.33) e (2.34a) em (2.32o) e (2.32b), (2.33) e (2.34b) em (2.32g), obtemos respectivamente:

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i^3 = \frac{-31}{120}, \quad (2.35a)$$

$$a_{32} a_{43} b_4 c_2 = \frac{-31}{720}. \quad (2.35b)$$

Em seguida, se substituirmos (2.32b), (2.33), (2.34), e (2.35b) em (2.32i) e (2.32b), (2.33), (2.34b) e (2.35a) em (2.32h), obtemos respectivamente:

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j c_i = \frac{-31}{240}, \quad (2.36a)$$

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j^2 = \frac{-31}{360}. \quad (2.36b)$$

Por fim, substituindo (2.32b), (2.33), (2.34), (2.35a) e (2.36a) em (2.32j) tiramos que $c_3 = -1$.

Portanto, o sistema (2.32) pode ser substituído pelas seguintes equações:

$$\bar{b}_1 + b_1 = 1, \quad (2.37a)$$

$$\sum_{i=1}^4 b_i = \frac{-1}{2}, \quad (2.37b)$$

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i = \frac{-5}{12}, \quad (2.37c)$$

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i^2 = \frac{-1}{3}, \quad (2.37d)$$

$$\sum_{i=2}^4 b_i c_i^3 = \frac{-31}{120}, \quad (2.37e)$$

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j = \frac{-1}{6}, \quad (2.37f)$$

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j^2 = \frac{-31}{360}, \quad (2.37g)$$

$$\sum_{i=3}^4 \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} b_i c_j c_i = \frac{-31}{240}, \quad (2.37h)$$

$$a_{32} a_{43} b_4 c_2 = \frac{-31}{720}. \quad (2.37i)$$

onde $c_3 = -1$.

Portanto, de um sistema com 14 equações ficamos agora com 9 equações, já que as equações (2.32f), (2.32l), (2.32m) e (2.32n) podem ser escritas como combinação linear das equações de (2.37), e da equação (2.32j) determinamos c_3 .

Daremos, a seguir os passos utilizados para a resolução do sistema acima, obtendo assim os coeficientes de um método *PRK2(4)* com ordem 5.

Das equações (2.37b), (2.37a), (2.37c), (2.37d) e (2.37e) determinamos b_1 , $\bar{b}_1$, b_2 , b_3 e b_4 , em função de c_2 e c_4 .

Seguindo, consideremos as equações (2.37f), (2.37g) e (2.37h), para determinarmos a_{32} , a_{42} e a_{43} em função de c_2 e c_4 .

Substituindo então a_{32} , a_{42} e b_4 em (2.37i), obtemos:

$$c_2(62c_4 - 85) = 0,$$

que nos leva a considerar $c_4 = \frac{62}{85}$, já que temos que considerar as restrições $c_2 \neq -1, 0$,

$\frac{62}{85}$, $\frac{31}{60}$ e $\frac{71}{90}$ para os coeficientes de b_1 , $\bar{b}_1$, b_2 , b_3 , b_4 , a_{32} , a_{42} e a_{43} .

Portanto, construímos a seguinte família de métodos $PRK2(4)$ com ordem 5.

0	0			
c_2	c_2			
-1	a_{31}	a_{32}		
$62/85$	a_{41}	a_{42}	a_{43}	(2.38)
	$\frac{-(91-166c_2)}{1488c_2}$	$\frac{91}{24c_2(62-23c_2-85c_2^2)}$	$\frac{31-60c_2}{3528(1+c_2)}$	$\frac{122825(71-90c_2)}{218736(-62+85c_2)}$
	$\frac{91+1322c_2}{1488c_2}$	$-b_2$	$-b_3$	$-b_4$

com:

$$a_{31} = c_3 - a_{32}, \quad a_{41} = c_4 - a_{42} - a_{43},$$

$$a_{32} = \frac{31(1+c_2)}{62c_2-120c_2^2}, \quad a_{42} = \frac{31(-562526+761595c_2+13175c_2^2)}{614125c_2(-71+19c_2+90c_2^2)},$$

$$a_{43} = \frac{3038(-1922+6355c_2-5100c_2^2)}{614125(-71+19c_2+90c_2^2)}.$$

Considerando então, a classe de métodos $PRK2(r)$, com $r = 2, 3$ e 4 , obtemos a seguinte relação entre número de estágios e ordem máxima alcançável $p = r + 1$, ou seja, considerando tais métodos com 2 estágios, a ordem máxima alcançada é 3, com 3 estágios, a ordem máxima é 4 e com 4 estágios, a ordem máxima é 5. Este último resultado nós não provamos, mas em [17] Nakashima afirma que para $r = 4$ a ordem máxima alcançada é 5.

2.6 Alguns casos particulares de métodos PRK2(r)

Vamos aqui apresentar alguns particulares métodos $PRK2(r)$, que serão utilizados para avaliações computacionais.

Considerando a família de métodos $PRK2$ com $r = 2$ e $p = 3$ dada em (2.10), e atribuindo particulares valores ao parâmetro livre $c_2 \neq 0$, obtemos os seguintes métodos:

i) Se $c_2 = \frac{-4}{10}$ temos:

0	0
$\frac{-4}{10}$	$\frac{-4}{10}$
	$\frac{-37}{34}$
	$\frac{25}{24}$
	$\frac{61}{24}$
	$\frac{-25}{24}$

(2.39)

ii) Se $c_2 = \frac{8}{10}$, temos:

0	0
$\frac{8}{10}$	$\frac{8}{10}$
	$\frac{1}{48}$
	$\frac{-25}{48}$
	$\frac{47}{48}$
	$\frac{25}{48}$

(2.40)



iii) Para $c_2 = \frac{11}{50000}$, obtemos o método:

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & 0 & \\
 \hline
 \frac{11}{50000} & \frac{11}{50000} & \\
 \hline
 & \frac{124967}{66} & \frac{-62500}{33} \\
 & \frac{-1249017}{66} & \frac{62500}{33}
 \end{array} \tag{2.41}$$

Sabendo-se que na expressão do erro de truncamento local para $PRK2(2)$ com ordem 3 a parte principal do erro apresenta três parcelas envolvendo os coeficientes do método e considerando que temos apenas o coeficiente c_2 como parâmetro livre, podemos escolhê-lo, a fim de eliminar uma dessas parcelas, buscando assim minimizar os efeitos do erro de truncamento e, conseqüentemente, refinando a aproximação gerada.

Dos três exemplos construídos essa idéia foi explorada no caso (ii), isto é, $c_2 = \frac{8}{10}$, torna nula a expressão $(-b_1 - b_2 + 3b_2c_2 - 3b_2c_2^2 - \frac{1}{4})$, que aparece na parte principal do erro de truncamento.

A partir da família determinada em (2.21), obtivemos alguns casos particulares para os métodos $PRK2(3)$ com $p = 4$.

i) Tomando $c_2 = \frac{-1}{10}$ e $c_3 = \frac{1}{10}$, encontramos o método:



$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{-1}{10} & \frac{-1}{10} & \\
 \frac{1}{10} & \frac{17}{90} & \frac{-4}{45} \\
 \hline
 & \frac{197}{6} & \frac{-175}{12} & \frac{-75}{4} \\
 & \frac{-191}{6} & \frac{175}{12} & \frac{75}{4}
 \end{array} \quad (2.42)$$

ii) Se $c_2 = \frac{31}{60}$ e $c_3 = \frac{62}{85}$, encontramos o método:

$$\begin{array}{c|cc}
 0 & & \\
 \frac{31}{60} & \frac{31}{60} & \\
 \frac{62}{85} & \frac{7502}{24565} & \frac{10416}{24565} \\
 \hline
 & \frac{-157}{23064} & \frac{1800}{6727} & \frac{-122825}{161448} \\
 & \frac{23221}{23064} & \frac{-1800}{6727} & \frac{122825}{161448}
 \end{array} \quad (2.43)$$

iii) Para $c_2 = \frac{31}{40}$ e $c_3 = \frac{124}{165}$, temos:

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & & & \\
 \hline
 \frac{31}{40} & \frac{31}{40} & & \\
 \\
 \frac{124}{165} & \frac{6076}{5445} & \frac{-1984}{5445} & \\
 \hline
 & \frac{911}{46128} & \frac{-3200}{2883} & \frac{9075}{15376} \\
 & \frac{45217}{46128} & \frac{3200}{2883} & \frac{-9075}{15376}
 \end{array} \quad (2.44)$$

Nos casos (ii) e (iii), os parâmetros c_2 e c_3 são escolhidos de forma a eliminar duas parcelas da parte principal do erro de truncamento local.

Finalmente, para a família de métodos $PRK2(4)$ com ordem 5, obtidas em (2.38), apresentamos alguns particulares métodos:

i) Para $c_2 = \frac{1}{10}$, temos:

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 \hline
 \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & & & \\
 \\
 -1 & \frac{-391}{50} & \frac{341}{50} & & \\
 \\
 \frac{62}{85} & \frac{-145743}{49130} & \frac{1944939}{540430} & \frac{5243}{54043} & \\
 \hline
 & \frac{-1}{2} & \frac{2275}{3531} & \frac{125}{19404} & \frac{-122825}{188748} \\
 & \frac{3}{2} & \frac{-2275}{3531} & \frac{-125}{19404} & \frac{122825}{188748}
 \end{array} \quad (2.45)$$

ii) Para $c_2 = \frac{1}{2}$, obtemos:

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
 -1 & \frac{-95}{2} & \frac{93}{2} & & \\
 \frac{62}{85} & \frac{325531}{1228250} & \frac{567331}{1228250} & \frac{1519}{614125} & \\
 \hline
 & \frac{-1}{93} & \frac{7}{27} & \frac{1}{5292} & \frac{-122825}{164052} \\
 & \frac{94}{93} & \frac{-7}{27} & \frac{-1}{5292} & \frac{122825}{164052}
 \end{array} \quad (2.46)$$

CAPÍTULO 3

UMA OUTRA CLASSE DE PSEUDO RUNGE-KUTTA

3.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos uma outra classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* proposta por Byrne e Lambert, e estudada por Nakashima em [15] e [16]. Assim como os métodos apresentados no capítulo 2, tais métodos também consideram uma combinação linear de aproximações para a derivada do problema, obtidas no passo corrente e no passo anterior.

Para tais métodos vamos determinar as condições de ordem e analisar a ordem máxima atingível em função do número de estágios considerado, seguindo um procedimento análogo ao considerado no capítulo anterior. Finalizando, através das condições de ordem, vamos construir algumas famílias de métodos com $r = 2, 3$ e 4 estágios.



3.2 Métodos Pseudo Runge-Kutta

Essa classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* com $(r-1)$ estágios, que apresentaremos por $PRK(r)$, é definida por:

y_{n+1} = v_1 y_{n-1} + v_2 y_n + h \sum_{i=1}^r b_i k_i, (3.1a)

k_i = f(x_n + c_i h, y_n + a_i(y_n - y_{n-1}) + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j), (3.1b)

com c_i = a_i + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, 0 < c_i \le 1 para i = 3(1)r.

Isto é: k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}), k_2 = f(x_n, y_n).

Vamos representar os coeficientes que definem um método de (3.1) através de uma tabela matricial, inspirada na tabela de Butcher, dada por :

-1								
0								
c_3	a_3	a_{31}	a_{32}					
c_4	a_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}				
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots			
c_r	a_r	a_{r1}	a_{r2}	...		a_{r,r-1}		
	b_1	b_2	b_3	...		b_r	v_1	v_2

(3.2)

Queremos determinar as condições de ordem para que um método definido por (3.1) tenha ordem p e analisar qual o maior valor assumível por p, em função do número de estágios.

Procedendo como anteriormente e considerando a hipótese local y(x_{n-i}) = y_{n-i} para i = -1 e 0, temos ilustrados k_1, k_2 e k_3, para essa classe de métodos até 3 estágios:



$$k_1 = f - hF + \frac{h^2}{2}(G + Ff_y) - \frac{h^3}{6}(I + f_y G + Ff_y^2 + 3FS) \\ + \frac{h^4}{24}(R + Gf_y^2 + 4GS + 7FSf_y + If_y + Ff_y^3 + 6FS_2 + 3Qf_{yy}) + O(h^5),$$

$$k_2 = f,$$

$$k_3 = f + hc_3F + h^2\left[\left(\frac{1}{2}c_3^2\right)G - \frac{1}{2}(a_3 + 2a_{31})Ff_y\right] \\ + h^3\left[\frac{1}{6}c_3^3I + \frac{1}{6}(a_3 + 3a_{31})(Gf_y + Ff_y^2) - \frac{1}{6}c_3(a_3 + 2a_{31})3FS\right] \\ + h^4\left[\frac{1}{24}c_3^4R + \frac{1}{24}c_3(a_3 + 3a_{31})(4GS + 4FSf_y) - \frac{1}{24}c_3^2(a_3 + 2a_{31})(6FS_2) \right. \\ \left. + \frac{1}{24}(a_3 + 2a_{31})^2(3Qf_{yy}) - \frac{1}{24}(a_3 + 4a_{31})(Gf_y^2 + If_y + Ff_y^3 + 3FSf_y)\right] + O(h^5).$$

Substituindo k_1 , k_2 e k_3 em $\tilde{y}_{n+1}$ e considerando (1.12), podemos obter a seguinte expressão para o erro local T_{n+1} definido em (1.5):

$$T_{n+1} = (v_1 + v_2) - I + h[v_1 - (b_1 + b_2 + b_3) + I] + \frac{h^2}{2}[-v_1 - 2b_3c_3 + 2b_1 + I] \\ + \frac{h^3}{6}[(v_1 - 3(b_3c_3^2) + I - 3b_1)G + (v_1 + 3(2a_{31} + a_3)b_3 - 3b_1 + I)Ff_y] \\ + \frac{h^4}{24}[(v_1 + 4b_3c_3^3 - 4b_1 - I)I + (4b_1 - 4b_3(a_3 + 3a_{31}) + I - v_1)(Gf_y + Ff_y^2) \\ + (4b_1 + 4b_3c_3(a_{23} + 2a_{31}) + I - v_1)3FS] + O(h^5). \quad (3.3)$$

A partir desse desenvolvimento podemos encontrar as condições de ordem dessa classe de métodos, quando consideramos $p \leq 4$.

3.3 As condições de ordem para PRK(2)

A classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* definidos por (3.1) com $r = 2$ é dada por:

$$y_{n+1} = v_1 y_{n-1} + v_2 y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2), \quad (3.4a)$$

$$k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}), \quad (3.4b)$$

$$k_2 = f(x_n, y_n). \quad (3.4c)$$

Considerando em (3.3) que $T_{n+1} = O(h^4)$ concluímos que o método (3.4) terá ordem $p = 3$, se forem satisfeitas as seguintes condições:

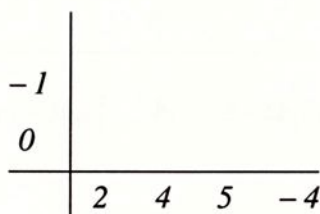
$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.5a)$$

$$-v_1 + b_1 + b_2 = 1, \quad (3.5b)$$

$$v_1 - 2b_1 = 1, \quad (3.5c)$$

$$-v_1 + 3b_1 = 1. \quad (3.5d)$$

A partir de (3.5) determinamos o seguinte *PRK(2)* definido por (3.1) com ordem 3.



3.4 As condições de ordem para PRK(3)

Considerando a classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* definidos por (3.1) com $r = 3$, ou seja, 2 estágios temos:

$$y_{n+1} = v_1 y_{n-1} + v_2 y_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + b_3 k_3), \quad (3.6a)$$

$$k_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1}), \quad (3.6b)$$

$$k_2 = f(x_n, y_n), \quad (3.6c)$$

$$k_3 = f(x_n + c_3 h, y_n + a_3(y_n - y_{n-1}) + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)), \quad (3.6d)$$

De (3.3) podemos concluir que o método (3.6) terá ordem $p = 3$ se estiverem satisfeitas as condições:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.7a)$$

$$-v_1 + (b_1 + b_2 + b_3) = 1, \quad (3.7b)$$

$$v_1 + 2b_3c_3 - 2b_1 = 1, \quad (3.7c)$$

$$-v_1 + 3b_3c_3^2 + 3b_1 = 1, \quad (3.7d)$$

$$-v_1 - 3b_3(2a_{31} + a_3) + 3b_1 = 1. \quad (3.7e)$$

Podemos então, determinar, a partir de (3.7), uma família de métodos a três parâmetros e com ordem 3, dada por:

$$\begin{array}{c|cccccc} -1 & -1 & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \\ c_3 & -(2a_{31} + c_3^2) & a_{31} & a_{32} & & & \\ \hline & 2 - 2b_3c_3 - 3b_3c_3^2 & 4 - b_3 - 4b_3c_3 - 3b_3c_3^2 & b_3 & 5 - 6b_3c_3 - 6b_3c_3^2 & -4 + 6b_3c_3 + 6b_3c_3^2 & \end{array} \quad (3.8)$$

com $a_{32} = c_3 - a_3 - a_{31}$.

Para que o método (3.6) alcance ordem $p = 4$, além de (3.7) devem ser satisfeitas também as seguintes condições:

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3c_3^3 = 1, \quad (3.9a)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3(a_3 + 3a_{31}) = 1, \quad (3.9b)$$

$$v_1 - 4b_1 - 4b_3c_3(a_3 + 2a_{31}) = 1. \quad (3.9c)$$

Logo de (3.7) e (3.9) determinamos uma família de métodos $PRK(3)$, com 2 estágios, a um parâmetro, definidos por (3.6) e com ordem $p = 4$.

Se considerarmos c_3 como parâmetro livre e as restrições $c_3 \neq -1, \frac{-1}{2}, 0$,

obtemos a seguinte família:

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3), \quad a_{31} = c_3^2 + c_3^3, \quad a_{32} = c_3 + 2c_3^2 + c_3^3,$$

$$b_1 = \frac{2(-1 + 2c_3^2)}{(2c_3 + 1)(c_3 + 1)}, \quad b_3 = \frac{2}{c_3(2c_3 + 1)(c_3 + 1)}, \quad b_2 = \frac{8c_3^2 - 2c_3 - 2}{c_3(2c_3 + 1)}, \quad (3.10)$$

$$v_1 = \frac{-7 + 10c_3}{2c_3 + 1}, \quad v_2 = \frac{8(1 - c_3)}{1 + 2c_3}.$$

Observe, que do sistema constituído por (3.7) e (3.9), determinamos os coeficientes a um parâmetro livre, pois a equação (3.9c) foi automaticamente satisfeita para os coeficientes de (3.10).

O mesmo sistema pode ser reescrito em uma forma simplificada. Isso facilitará para obtenção das condições de ordem quando considerarmos um número maior de estágios.

Considerando os coeficientes:

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3), \quad (3.11a)$$

$$a_{31} = c_3^2 + c_3^3, \quad (3.11b)$$

obtemos:

$$c_3^2 = -(a_3 + 2a_{31}), \quad (3.12a)$$

$$c_3^3 = a_3 + 3a_{31}. \quad (3.12b)$$

Daí, considerando (3.12a) a equação (3.7e) se reduz a (3.7d) e a equação (3.9c) se reduz a (3.9a).

Analogamente, se considerarmos (3.12b), a equação (3.9b) se reduz a (3.9a).

Portanto, obtemos um novo sistema, equivalente ao anterior, que garante ao método ordem $p = 4$, dado por:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.13a)$$

$$-v_1 + (b_1 + b_2 + b_3) = 1, \quad (3.13b)$$

$$v_1 - 2b_1 + 2b_3 c_3 = 1, \quad (3.13c)$$

$$-v_1 + 3b_1 + 3b_3 c_3^2 = 1, \quad (3.13d)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3 c_3^3 = 1, \quad (3.13e)$$

$$c_3^2 = -(a_3 + 2a_{31}), \quad (3.13f)$$



$$c_3^3 = a_3 + 3a_{31}, \quad (3.13g)$$

Esse novo sistema, formado pelas equações de (3.13), pode ser descrito através de uma lei de formação, isto é, para que o método tenha ordem $p = 4$ devemos considerar as condições de ordem:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.14a)$$

$$(-1)^j v_1 + j \sum_{i=1}^3 c_i^{j-1} b_i = 1, \quad (j = 1, 2, 3, 4), \quad (3.14b)$$

$$\text{e } c_3^i = (-1)^{i+1} (a_3 + ia_{31}), \quad (i = 2, 3). \quad (3.14c)$$

Se desejarmos obter métodos apenas com ordem $p = 3$ basta considerarmos $j = 1, 2, 3$ em (3.14b) e $i = 2$.

3.5 As condições de ordem para PRK (4)

Como desejamos considerar métodos dessa classe com $r = 4$, isto é, 3 estágios devemos considerar a expansão de k_4 em série de potência, na vizinhança de x_n , obtendo:

$$\begin{aligned} k_4 = & f + hc_3 F + h^2 \left[\left(\frac{1}{2} c_4^2 \right) G - \left(\frac{1}{2} (a_4 - 2a_{41}) + a_{43} c_3 \right) F f_y \right] \\ & + h^3 \left[\frac{1}{6} c_4^3 I + \left(\frac{1}{6} (a_4 + 3a_{41}) + \frac{1}{2} a_{43} c_3^2 \right) G f_y + \left(\frac{1}{6} (a_4 + 3a_{41}) - \frac{1}{2} a_{43} (a_3 + 2a_{31}) \right) F f_y^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{6} c_4 (a_4 + 2a_{41}) + \frac{1}{3} a_{43} c_3 c_4 \right] 3FS + h^4 \left[\frac{1}{24} c_4^4 R + \left(\frac{-1}{24} (a_4 + 4a_{41}) + \frac{1}{6} a_{43} c_3^3 \right) I f_y \right. \\ & \left. + \left(-\frac{1}{24} c_4^2 (a_4 + 2a_{31}) + \frac{1}{12} a_{43} c_3 c_4^2 \right) 6FS^2 + \left(-\frac{1}{24} (a_4 + 4a_{41}) + \frac{1}{6} a_{43} (a_4 + 3a_{41}) \right) (G f_y^2 + F f_y^3) \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{24} (a_4 + 2a_{41} + 2a_{43} c_3) \right)^2 3Q f_{yy} + \left(\frac{1}{24} c_4 (a_4 + 3a_{41}) + \frac{1}{8} a_{43} c_3^2 c_4 \right) 4GS \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{6} c_4 (a_4 + 3a_{41}) - \frac{1}{2} a_{43} c_4 (a_3 + 2a_{31}) - \frac{1}{2} a_{43} c_3 (a_3 + 2a_{31}) - \frac{1}{8} (a_4 + 4a_{41}) \right) FS f_y \right] + O(h^5). \end{aligned}$$

Dai, construímos a expansão de T_{n+1} em potências de h , a partir do que, geramos as condições de ordem.

Desenvolvendo raciocínio análogo ao considerado no parágrafo anterior, encontramos que o método *Pseudo Runge-Kutta* terá ordem 4 se as seguintes condições de ordem se verificarem :

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.15a)$$

$$-v_1 + (b_1 + b_2 + b_3 + b_4) = 1, \quad (3.15b)$$

$$v_1 - 2b_1 + 2b_3c_3 + 3b_4c_4 = 1, \quad (3.15c)$$

$$-v_1 + 3b_1 + 3b_3c_3^2 + 3b_4c_4^2 = 1, \quad (3.15d)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3c_3^3 + 4b_4c_4^3 = 1, \quad (3.15e)$$

$$-v_1 + 3b_1 - 3b_3(a_3 + 2a_{31}) - 3b_4(a_4 + 2a_{41} - 2a_{43}c_3) = 1, \quad (3.15f)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3(a_3 + 3a_{31}) + 4b_4(a_4 + 3a_{41} + 3a_{43}c_3^2) = 1, \quad (3.15g)$$

$$v_1 - 4b_1 - 4b_3c_3(a_3 + 2a_{31}) - 4b_4c_4(a_4 + 2a_{41} - 2a_{43}c_3) = 1, \quad (3.15h)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3(a_3 + 3a_{31}) + 4b_4(a_4 + 3a_{41} - 3a_{43}(a_3 + 2a_{31})) = 1. \quad (3.15i)$$

Observe que temos em (3.15) 9 equações a 13 incógnitas, o que nos permitiu determinar uma família de métodos com ordem 4, dada por:

$$b_1 = \frac{-2 + 4c_3^2 - 3b_4c_3c_4 - 4b_4c_3^2c_4 + 3b_4c_4^2 - 6b_4c_3^2c_4^2 + 4b_4c_4^3 + 6b_4c_3c_4^2}{(1 + 3c_3 + 2c_3^2)},$$

$$b_2 = 1 - (b_3 + b_4 + b_1) + v_1, \quad b_3 = \frac{2 - b_4c_4 - 3b_4c_4^2 - 2b_4c_4^3}{c_3 + 3c_3^2 + 2c_3^3},$$

$$v_1 = \frac{-7 + 10c_3 - 12b_4c_3c_4 + 12b_4c_4^2 - 12b_4c_3c_4^2 + 12b_4c_4^3}{1 + 2c_3}, \quad (3.16)$$

$$v_2 = \frac{4(2 - 2c_3 + 3b_4c_3c_4 - 3b_4c_4^2 + 2b_4c_3c_4^2 - 3b_4c_4^3)}{1 + 2c_3},$$

$$a_4 = \frac{4a_{31} - 4c_3^2 - 4c_3^3 + b_4(6a_{43}c_3^2 + 24a_{43}c_3^3 + 30a_{43}c_3^4 + 12a_{43}c_3^5 + 2c_4c_3^2) + N}{b_4c_3(1 + 3c_3 + 2c_3^2)},$$

$$a_{41} = \frac{-2a_{31} + 2c_3^2 + 2c_3^3 + b_4(-2a_{43}c_3^2 - 9a_{43}c_3^3 - 13a_{43}c_3^4 - 6a_{43}c_3^5 + 3a_{31}c_4^2) + M}{b_4c_3(1 + 3c_3 + 2c_3^2)},$$

$$a_{42} = c_4 - (a_4 + a_{41} + a_{43}),$$

$$\text{onde } M = b_4(a_{31}c_4 - c_4c_3^2 - c_4c_3^3 + c_3c_4^2 - c_3^3c_4^2 + c_3c_4^3 + c_3^2c_4^3 + 2a_{31}c_4^3),$$

$$N = b_4(-2a_{31}c_4 - 6a_{31}c_4^2 - 4a_{31}c_4^3 + 2c_4c_3^3 - 3c_3c_4^2 - 3c_3^2c_4^2 - 2c_3c_4^3 - 2c_3^2c_4^3),$$

com $c_3 \neq \frac{-1}{2}$, -1 e de 0 , tendo c_3 , c_4 , a_{43} , a_{31} e b_4 como parâmetros livres, já que para os

coeficientes determinados em (3.16) a equação de (3.15i) é satisfeita.

Para que o método $PRK(4)$ alcance ordem $p = 5$, terão que ser satisfeitas, além de (3.16) as seguintes equações:

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3^4 + 5b_4c_4^4 = 1, \quad (3.17a)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} - 4a_{43}(a_3 + 3a_{31})) = 1, \quad (3.17b)$$

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3(a_3 + 3a_{31}) + 5b_4c_4(a_4 + 3a_{41} + 3a_{43}c_3^2) = 1, \quad (3.17d)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} - 4a_{43}c_3^3) = 1, \quad (3.17e)$$

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3(a_3 + 2a_{31})^2 + 5b_4(a_4 + 2a_{41} + 2a_{43}c_3)^2 = 1, \quad (3.17f)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} + 4a_{43}c_3(a_3 + 2a_{31})) = 1, \quad (3.17g)$$

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3(a_3 + 3a_{31}) + 5b_4c_4(a_4 + 3a_{41} - 3a_{43}(a_3 + 2a_{31})) = 1. \quad (3.17h)$$

Das equações (3.15a) a (3.15h), determinamos em função de c_3 e c_4 os coeficientes v_1 , v_2 , b_1 , b_2 , b_3 , a_{31} , a_3 , a_4 . Das equações (3.17a), (3.17d), (3.17g) determinamos respectivamente os coeficientes b_4 , a_4 , a_{43} em função de c_3 e c_4 .

Considerando os coeficientes determinados e substituindo-os nas demais equações, que são (3.15i), (3.17b), (3.17c), (3.17e), (3.17f), constatamos que tais equações são automaticamente satisfeitas.

Portanto, do sistema formado por (3.15) e (3.17), podemos determinar uma família de métodos $PRK(4)$ a 2 parâmetros com ordem 5, dada por:

$$b_1 = \frac{2(3 - 5c_3^2 + c_3c_4 - 5c_4^2 + 10c_3^2c_4^2)}{(1 + c_3)(1 + 2c_4)(3 + 5c_3 + 5c_4 + 10c_3c_4)},$$

$$b_2 = \frac{2(2 + c_3 - 5c_3^2 + c_4 + 4c_3c_4 - 5c_3^2c_4 - 5c_4^2 - 5c_3c_4^2 + 20c_3^2c_4^2)}{c_3c_4(3 + 5c_3 + 5c_4 + 10c_3c_4)},$$

$$b_3 = \frac{2(-2 - c_4 + 5c_4^2)}{c_3(1 + c_3)(-3c_3 - 5c_3^2 + 3c_4 - 10c_3^2c_4 + 5c_4^2 + 10c_3c_4^2)}, \quad (3.18)$$

$$b_4 = \frac{4 + 2c_3 - 10c_3^2}{c_4(c_4 - c_3)(1 + c_4)(3 + 10c_3c_4 + 5(c_3 + c_4))},$$

$$v_1 = \frac{27 - 35c_3 - 35c_4 + 50c_3c_4}{3 + 5c_3 + 5c_4 + 10c_3c_4}, \quad v_2 = 1 - v_1,$$

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3), \quad a_{31} = c_3^2 + c_3^3, \quad a_{32} = c_3 + 2c_3^2 + c_3^3,$$

$$a_4 = 6a_{43}(c_3 + c_3^2) - 3c_4^2 - 2c_4^3, \quad a_{41} = -a_{43}(2c_3 + 3c_3^2) + c_4^2 + c_4^3,$$

$$a_{42} = c_4 - (a_4 + a_{41} + a_{43}),$$

$$a_{43} = \frac{c_4(1 + c_4)(c_3 + c_3^2 - c_4 + 3c_3^2c_4 - c_4^2 - 3c_3c_4^2)}{-2c_3 - 7c_3^2 - 2c_3^3 + 13c_3^4 + 10c_3^5},$$

$$\text{com } c_3 \neq -1, \frac{-1}{2}, 0, \frac{1 \pm \sqrt{41}}{10}, \frac{-3 - 5c_4}{5(1 + 2c_4)} \text{ e } c_3 \neq c_4.$$

Temos que os coeficientes a_3 e a_{31} , de (3.18) são os mesmos determinados em (3.10), logo podemos considerar (3.12). E de (3.18) se considerarmos os coeficientes a_4 , a_{41} obtemos as seguintes expressões para c_4 :

$$c_4^2 = -a_4 - 2a_{41} + 2a_{43}c_3, \quad (3.19a)$$

$$c_4^3 = a_4 + 3a_{41} + 3a_{43}c_3^2. \quad (3.19b)$$

Considerando (3.12) e (3.19) no sistema formado por (3.15) e (3.17), podemos reescrevê-lo como:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.20a)$$

$$-v_1 + (b_1 + b_2 + b_3 + b_4) = 1, \quad (3.20b)$$

$$v_1 - 2b_1 + 2b_3c_3 + 3b_4c_4 = 1, \quad (3.20c)$$

$$-v_1 + 3b_1 + 3b_3c_3^2 + 3b_4c_4^2 = 1, \quad (3.20d)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3c_3^3 + 4b_4c_4^3 = 1, \quad (3.20e)$$

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3^4 + 5b_4c_4^4 = 1, \quad (3.20f)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} - 4a_{43}c_3^3) = 1. \quad (3.20g)$$

Podemos reescrever as equações de (3.20) numa forma mais geral, isto é:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (3.21a)$$

$$(-1)^j v_1 + j \sum_{i=1}^r c_i^{j-1} b_i = 1, \quad (r=4, j=1, 2, 3, 4, 5), \quad (3.21b)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} - 4a_{43}c_3^3) = 1, \quad (3.21c)$$

$$c_3^i = (-1)^{i+1}(a_3 + ia_{31}), \quad (i=2, 3), \quad (3.21d)$$

$$c_4^i = (-1)^{i+1}a_4 + i((-1)^{i+1}a_{41} + a_{43}c_3^{i-1}), \quad (i=2, 3). \quad (3.21e)$$

O método *PRK(2)* definido por (3.1) terá ordem $p = 4$ se forem satisfeitas as condições de ordem encontradas em (3.14).

Considerando de (3.14) as equações (3.14b) para $j = 2, 3, 4$, constatamos que as mesmas não se verificam para nenhum valor de v_1 e b_1 . Logo, não conseguimos alcançar ordem 4.

Por sua vez, o método *PRK(3)*, terá ordem $p = 5$ se forem satisfeitas as condições de ordem encontradas em (3.21), o que conforme mostramos não é possível.

Considerando de (3.21) as equações (3.21b) para $j=1, 2, 3, 4$, determinamos v_1 , b_1 , b_2 e b_3 em função de c_3 , e das equações (3.21d), determinamos a_3 e a_{31} em função de c_3 .

Finalmente, substituindo v_1, b_1, b_2, b_3, a_3 e a_{30} , nas equações (3.21c) e (3.21b) com $j = 5$, concluímos que não existe c_3 que satisfaça às duas equações. Logo, o método $PRK(3)$ tem ordem máxima 4.

Para a classe de métodos $PRK(4)$, conforme Nakashima [17] não é possível alcançar ordem $p = 6$.

Logo, para a classe de métodos $PRK(r)$, com $r = 2, 3$ e 4 , e considerando que o número de estágios é sempre igual a $(r-1)$, podemos estabelecer entre a ordem p e r a relação $p = r+1$, quando p é a ordem máxima alcançável para aquele número de estágios. Isto é, para os três valores de r teremos que a ordem máxima será igual ao número de estágios mais 2.

3.6 Alguns casos particulares de métodos $PRK(r)$

Apresentaremos, a seguir, alguns particulares métodos $PRK(r)$, que serão utilizados para testes computacionais.

Considerando a família de métodos PRK com $r = 3$ e $p = 4$ dada em (3.10), tendo $c_3 \neq -1, \frac{-1}{2}, 0$ como parâmetro livre, obtemos os seguintes casos particulares:

i) Se tomarmos $c_3 = \frac{99}{100}$ temos:

$$\begin{array}{c|ccc}
 -1 & & & \\
 0 & & & \\
 \hline
 \frac{99}{100} & \frac{-2440449}{500000} & \frac{1950399}{1000000} & \frac{3920499}{1000000} \\
 \hline
 & \frac{9602}{29651} & \frac{19304}{14751} & \frac{1000000}{2935449} \quad \frac{145}{149} \quad \frac{4}{149}
 \end{array} \tag{3.22}$$



ii) Se $c_3 = \frac{1 + \sqrt{41}}{10}$, temos o seguinte método:

$$\begin{array}{c|cccc}
 -1 & & & & \\
 0 & & & & \\
 \hline
 \frac{1 + \sqrt{41}}{10} & \frac{-377 - 37\sqrt{41}}{250} & \frac{4(17 + 21\sqrt{41})}{125} & \frac{133 + 23\sqrt{41}}{125} & \\
 \hline
 & \frac{4(-4 + \sqrt{41})}{107 + 17\sqrt{41}} & \frac{2(29 - \sqrt{41})}{47 + 7\sqrt{41}} & \frac{250}{201 + 31\sqrt{41}} & \frac{5(-6 + \sqrt{41})}{6 + \sqrt{41}} \quad \frac{4(9 - \sqrt{41})}{6 + \sqrt{41}}
 \end{array} \quad (3.23)$$

iii) Para $c_3 = 1$, obtemos o método:

$$\begin{array}{c|cccc}
 -1 & & & & \\
 0 & & & & \\
 1 & -5 & 2 & 4 & \\
 \hline
 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & 1 \quad 0
 \end{array} \quad (3.24)$$

A parte do erro de truncamento local para $PRK(3)$ com ordem 4 apresenta quatro parcelas envolvendo os coeficientes do método e considerando que temos apenas c_3 como parâmetro livre, podemos escolhê-lo a fim de eliminar pelo menos uma dessas parcelas, buscando, assim, minimizar os efeitos do erro de truncamento.

No caso (ii), se escolhermos o parâmetro $c_3 = \frac{1 + \sqrt{41}}{10}$, conseguimos anular três das quatro parcelas da parte principal do erro de truncamento local. São elas :

$$-v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3^4 - 1, -v_1 + 5b_1 + 5b_3c_3(a_3 + 3a_{31}) - 1, -v_1 + 5b_1 + 5b_3(a_3 + 2a_{31})^2 - 1.$$

Para a família determinada em (3.18), apresentaremos particulares métodos $PRK(4)$ com $p = 5$, a partir de escolhas de c_3 e c_4 .

i) Tomando $c_3 = \frac{3}{10}$ e $c_4 = \frac{7}{10}$, encontramos o método:

$$\begin{array}{c|cccc}
 -1 & & & & \\
 0 & & & & \\
 \frac{3}{10} & \frac{-81}{250} & \frac{117}{1000} & \frac{507}{1000} & \\
 \frac{7}{10} & \frac{14119}{37000} & \frac{-106267}{962000} & \frac{-145537}{222000} & \frac{31297}{28860} \\
 \hline
 & \frac{1502}{22321} & \frac{1544}{2121} & \frac{-1250}{3939} & \frac{9250}{12019} & \frac{25}{101} & \frac{76}{101}
 \end{array} \quad (3.25)$$

ii) Se $c_3 = \frac{4}{10}$ e $c_4 = \frac{8}{10}$, encontramos o método:

$$\begin{array}{c|cccc}
 -1 & & & & \\
 0 & & & & \\
 \frac{4}{10} & \frac{-76}{125} & \frac{28}{125} & \frac{98}{125} & \\
 \frac{8}{10} & \frac{106}{125} & \frac{-256}{875} & \frac{-221}{250} & \frac{79}{70} \\
 \hline
 & \frac{86}{3843} & \frac{19}{61} & \frac{125}{427} & \frac{250}{549} & \frac{5}{61} & \frac{56}{61}
 \end{array} \quad (3.26)$$

iii) Para $c_3 = \frac{8}{10}$ e $c_4 = 1$, temos:

$$\begin{array}{c|cccc}
 -1 & & & & \\
 0 & & & & \\
 \frac{8}{10} & \frac{-368}{125} & \frac{144}{125} & \frac{324}{125} & \\
 1 & -17 & \frac{62}{9} & \frac{25}{2} & \frac{-25}{18} \\
 \hline
 & \frac{1}{18} & \frac{11}{20} & \frac{25}{36} & \frac{-1}{10} & \frac{1}{5} & \frac{4}{5}
 \end{array} \quad (3.27)$$

CAPÍTULO 4

UMA CLASSE PARTICULAR DE MÉTODOS PSEUDO RUNGE-KUTTA

4.1 Introdução

Ainda em [17] Nakashima apresenta uma classe particular dos “*Métodos Pseudo Runge-Kutta*”, definidos no capítulo 3.

A partir das condições de ordem e das famílias de métodos determinadas no capítulo anterior, vamos, a seguir, considerar essa particular classe de Pseudo Runge-Kutta, obter as condições de ordem, analisar a ordem máxima alcançável em função do número de estágios, e construir algumas famílias de tais métodos.



4.2 A nova classe de métodos PRK (r)

Se considerarmos em (3.1):

v_1=0 , v_2=1 e a_i=0 para i = (1)r, (4.1)

obtemos uma classe particular de tais métodos, proposta em [17] e definidos como:

y_{n+1}= y_n + h \sum_{i=1}^r b_i k_i (4.2a)

k_1= f(x_{n-1},y_{n-1}) (4.2b)

k_2= f(x_n,y_n) (4.2c)

k_i= f(x_n+ c_i h, y_n+ h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j) (4.2d)

com: c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} e 0 < c_i \le 1 para i = 3(1)r.

Observe que as derivadas de (4.2c) e (4.2d) são as mesmas que se considera quando trabalhamos com um método de Runge-Kutta explícitos com r estágios e tendo os mesmos coeficientes c_i e a_{ij}.

Isto é, os métodos PRK(r) desta nova classe devem ter um comportamento muito semelhante a correspondentes métodos RK(r) que apresentam valores iguais para os respectivos coeficientes c_i , a_{ij} e b_i.

Para tais métodos a tabela representativa dos coeficientes será:

-1					
0					
c_3	a_{31}	a_{32}			
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	
c_r	a_{r1}	a_{r2}	a_{r3}	\cdots	a_{r,r-1}
	b_1	b_2	\cdots		b_r

(4.3)



4.3 Um método PRK(2)

Utilizando (3.3) e considerando (4.1), obtemos as condições de ordem para que o método (4.2) tenha ordem 2, que são dadas por:

$$b_1 + b_2 = 1 \quad (4.4a)$$

$$-2b_1 = 1 \quad (4.4b)$$

De (4.4) obtemos um único método PRK(2), dado por:

$$\begin{array}{c|c} -1 & \\ \hline 0 & \\ \hline & -\frac{1}{2} \quad \frac{3}{2} \end{array}$$

Para que o mesmo método tenha ordem 3, as seguintes condições terão que ser satisfeitas, considerando-se (3.5) e levando em conta (4.1):

$$b_1 + b_2 = 1 \quad (4.5a)$$

$$-2b_1 = 1 \quad (4.5b)$$

$$3b_1 = 1 \quad (4.5c)$$

De (4.5), concluímos que não existe valor de b_1 que satisfaça o sistema, logo a ordem máxima alcançada será $p=2$.

4.4 A família de PRK(3)

Tomando (3.7) e considerando (4.1), podemos também obter as condições de ordem para que o método definido em (4.2) com $r=3$ tenha ordem $p=3$, que serão:



$$b_1 + b_2 + b_3 = 1 \quad (4.6a)$$

$$-2b_1 + 2b_3 c_3 = 1 \quad (4.6b)$$

$$3b_1 + 3b_3 c_3^2 = 1 \quad (4.6c)$$

$$3b_1 - 6a_{32}b_3 = 1 \quad (4.6d)$$

Logo, temos 4 equações e 5 incógnitas, o que nos permite determinar uma família de métodos a um parâmetro definidos por (4.2).

Resolvendo ao sistema obtemos a seguinte família de métodos definidos por (4.2), com $r = 3$ e ordem $p = 3$:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ -1 & & \\ c_3 & \frac{-c_3^2}{2} & \frac{2c_3 + c_3^2}{2} \\ \hline & \frac{2-3c_3}{6(1+c_3)} & \frac{9c_3-5}{6c_3} & \frac{5}{6c_3(1+c_3)} \end{array} \quad (4.7)$$

com $c_3 \neq 0, -1$.

Observamos que essa mesma família pode ser obtida a partir de (3.8), considerando-se as restrições de (4.1).

A partir da família de métodos *PRK* (3) com ordem 4 dados por (3.10), vamos analisar se a classe de métodos (4.2) com $r = 3$ alcança ordem 4.

De (3.10) temos que $c_3 \neq 0$ e

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3). \quad (4.8)$$

Considerando então (4.8) e sabendo-se que por (4.1) para essa classe particular de métodos $a_3 = 0$, obtemos então $c_3 = 0$, o que contraria a hipótese de que $c_3 \neq 0$. Logo para tal classe de métodos com $r = 3$ a ordem máxima alcançável é 3.

4.5 A família de PRK(4)

Considerando (4.1) em (3.15), obtemos as condições de ordem, para que o método tenha ordem 4, que são:

$$b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1 \quad (4.9a)$$

$$-2b_1 + 2b_3c_3 + 3b_4c_4 = 1 \quad (4.9b)$$

$$3b_1 + 3b_3c_3^2 + 3b_4c_4^2 = 1 \quad (4.9c)$$

$$-4b_1 + 4b_3c_3^3 + 4b_4c_4^3 = 1 \quad (4.9d)$$

$$3b_1 - 6b_3a_{31} - 6b_4a_{41} + 6b_4a_{43}c_3 = 1 \quad (4.9e)$$

$$-4b_1 + 12b_3a_{31} + 12b_4a_{41} + 12b_4a_{43}c_3^2 = 1 \quad (4.9f)$$

$$-4b_1 - 8b_3c_3a_{31} - 8b_4c_4a_{41} + 8b_4c_4a_{43}c_3 = 1 \quad (4.9g)$$

$$-4b_1 + 12b_3a_{31} + 12b_4a_{41} - 24b_4a_{43}a_{31} = 1 \quad (4.9h)$$

Resolvendo o sistema (4.9), obtemos a seguinte família de métodos, definida por (4.2) com $r = 4$ e ordem 4, dada por:

$$b_1 = \frac{-3 + 4c_3 + 4c_4 - 6c_3c_4}{12(1+c_3)(1+c_4)}, \quad b_2 = \frac{7 - 10c_3 - 10c_4 + 18c_3c_4}{12c_3c_4},$$

$$b_3 = \frac{-7 + 10c_4}{12c_3(1+c_3)(-c_3+c_4)}, \quad b_4 = \frac{-7 + 10c_3}{12c_4(c_3-c_4)(1+c_4)}, \quad (4.10)$$

$$a_{31} = \frac{-c_3^2}{2}, \quad a_{41} = \frac{c_4(21c_3 + 14c_3^2 + 12c_3c_4 - 15c_3^2c_4 - 30c_3^3c_4 - 14c_4^2 - 24c_3c_4^2)}{6(1+c_3)^2(-7+10c_3)},$$

$$a_{43} = \frac{(c_3 - c_4)c_4(21 + 14c_3 + 14c_4 + 24c_3c_4)}{6c_3(1+c_3)^2(-7+10c_3)},$$

com as restrições, $c_3 \neq -1, 0$, $\frac{7}{10}$, $c_4 \neq -1, 0$ e $c_3 \neq c_4$.

Para que o método definido por (4.2) com $r = 4$ tenha ordem 5, terão que ser satisfazer além de (4.9), também (3.17) considerando-se as restrições de (4.1).



Logo, levando em conta (4.1), podemos, através de (3.18), verificar se é possível determinarmos uma família de métodos definida por (4.2) com $p=5$.

Como no caso anterior, de (3.18) temos que $c_3 \neq 0$ e

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3). \quad (4.11)$$

Sabendo que, para essa classe particular de métodos $a_3 = 0$ e considerando (4.11), obtemos então $c_3 = 0$, o que contraria a hipótese de que $c_3 \neq 0$. Logo para tal classe de métodos com $r = 4$ a ordem máxima alcançável é 4.

Logo, para essa classe particular de métodos $PRK(r)$, com $r = 2, 3$ e 4 , e considerando que o número de estágios é sempre igual a $(r-1)$, podemos estabelecer entre a ordem p e r a relação $p = r$, quando p é a ordem máxima alcançável para aquele número de estágios. Isto é, para os três valores de r teremos que a ordem máxima será igual ao número de estágios mais 1.

Apresentaremos a seguir, alguns casos particulares para essa nova classe de métodos $PRK(r)$, para utilizarmos nas avaliações computacionais.

Consideremos a família de métodos $PRK(3)$ que determinamos em (4.7), e as restrições $c_3 \neq -1, 0$.

Se tomarmos $c_3 = 1, \frac{7}{10}$ e $\frac{9}{10}$, obtemos respectivamente os métodos:

$$\begin{array}{c|cc} -1 & & \\ 0 & & \\ 1 & \frac{-1}{2} & \frac{3}{2} \\ \hline & \frac{-1}{12} & \frac{2}{3} & \frac{5}{12} \end{array} \quad (4.12)$$

$$\begin{array}{c|cc}
 -1 & & \\
 0 & & \\
 \hline
 \frac{7}{10} & \frac{-49}{200} & \frac{189}{200} \\
 \hline
 & \frac{-1}{102} & \frac{13}{42} & \frac{250}{357}
 \end{array} \quad (4.13)$$

$$\begin{array}{c|cc}
 -1 & & \\
 0 & & \\
 \hline
 \frac{9}{10} & \frac{-81}{200} & \frac{261}{200} \\
 \hline
 & \frac{-7}{114} & \frac{31}{54} & \frac{250}{513}
 \end{array} \quad (4.14)$$

É importante observar que, ao considerarmos $c_3 = \frac{7}{10}$, eliminamos duas das três parcelas que constituem a parte principal do erro.

Considerando por fim a família de métodos $PRK(4)$, dada em (4.10), temos.

i) Para os pares de valores $c_3 = \frac{1}{2}$, $c_4 = 1$ e $c_3 = \frac{4}{5}$, $c_4 = 1$, obtemos respectivamente:

$$\begin{array}{c|ccc}
 -1 & & & \\
 0 & & & \\
 \hline
 \frac{1}{2} & \frac{-1}{8} & \frac{5}{8} & \\
 \hline
 1 & \frac{1}{2} & \frac{-3}{2} & 2 \\
 \hline
 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6}
 \end{array} \quad (4.15)$$

-1				
0				
$\frac{4}{5}$	$\frac{-8}{25}$	$\frac{28}{25}$		
1	$\frac{-95}{81}$	$\frac{217}{72}$	$\frac{-545}{648}$	
	$\frac{-1}{72}$	$\frac{17}{48}$	$\frac{125}{144}$	$\frac{-5}{24}$

(4.16)

ii) Se tomarmos $c_2 = \frac{9}{10}$ e $c_3 = 1$, obtemos:

-1				
0				
$\frac{9}{10}$	$\frac{-81}{200}$	$\frac{261}{200}$		
1	$\frac{-1429}{2166}$	$\frac{1885}{1026}$	$\frac{-1730}{9747}$	
	$\frac{-1}{57}$	$\frac{7}{18}$	$\frac{250}{171}$	$\frac{-5}{6}$

(4.17)

Neste último exemplo, escolhemos c_2 e c_3 de modo a obtermos uma minimização das parcelas que constituem a parte principal do erro de truncamento local.

Sendo que, a principal característica dessas 3 classes de métodos *Pseudo Runge - Kutta* estudadas, é o reaproveitamento da função por passo, construímos a seguir, uma tabela fazendo uma análise, quanto ao esforço computacional despendido para avaliar as derivadas do problema a cada passo, comparando as 3 classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta* estudadas, entre si e com a classe de métodos de *Runge-Kutta*.

Tabela 4.1

	PRK2	PRK	Part. PRK	RK
ordem	Número de avaliação da função por passo			
3	2	1	2	3
4	3	2	3	4
5	4	3	—	6

Da *tabela 4.1*, concluímos que as duas classes de métodos *PRK2* e *part. PRK*, possuem um gasto de avaliações da função por passo equivalente, quando comparados na mesma ordem, mais essas duas classes requerem menos avaliações da função por passo, quando comparados com a classe de métodos de *Runge-Kutta*, na mesma ordem.

Considerando, a classe de métodos *PRK*, observamos ainda, que tais classes, quando comparadas com as 2 classes, *PRK2* e *part. PRK*, requer menos avaliação da função por passo, numa mesma ordem, e mais ainda, superam com vantagem a classe de métodos de *Runge-Kutta*, em se tratando da economia do número de avaliações da função, gasta por passo, na mesma ordem.

CAPÍTULO 5

MÉTODOS PSEUDO RUNGE KUTTA PARA INTEGRAÇÃO A PASSO VARIÁVEL

5.1 Introdução

A possibilidade de mudança do tamanho do passo durante o processo de integração é hoje algo fundamental ao se trabalhar com métodos numéricos. Neste capítulo vamos analisar uma formulação para a classe dos métodos *Pseudo Runge-Kutta* que permita efetuar mudanças do tamanho do passo, utilizando os k_i 's já determinados. A vantagem maior desses métodos está em permitir gerar novas aproximações para a solução do *p.v.i.* sem qualquer avaliação adicional da derivada $f(x,y)$.

Vamos determinar as condições de ordem para essa classe de métodos e analisar qual a ordem alcançável ao considerarmos $r = 2, 3$ e 4 . Em seguida, apresentaremos algumas famílias de métodos, por nós construídas.



5.2 A formulação do método a passo variável

A partir da classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* com $(r-1)$ estágios, definidos em (3.1), construiremos um método que permita determinar aproximações entre os pontos x_{n+k} e $x_{n+(k+1)}$, a partir das aproximações y_{n+k} e $y_{n+(k+1)}$ já determinadas ($k=0,1,2,\dots$), reaproveitando-se os k_i 's obtidos durante esse passo de integração.

Esse método especial com $(r-1)$ estágios será denotado por $PRK(\sigma, r)$ e definido de forma análoga a (3.1), denotando por $y_{n+\sigma}$ a aproximação por ele gerada no ponto $x_n + \sigma h$. Logo, tal método será escrito como:

$$y_{n+\sigma} = v_1 y_{n-1} + v_2 y_n + h \sum_{i=1}^r b_i k_i. \quad (5.1)$$

Assim, através de (5.1), podemos determinar aproximações $y_{n+\sigma}$ sem a necessidade de efetuarmos novas avaliações das derivadas k_i 's, pois os coeficientes c_i , a_i e a_{ij} são independentes do fator σ .

A obtenção das condições de ordem para métodos definidos por (5.1) será feita de maneira análoga ao desenvolvido nos capítulos anteriores, ou seja, determinaremos o erro de truncamento local de (5.1), expandindo em série de Taylor o seu lado direito em potências de h numa vizinhança de $x = x_n$.

5.3 A classe de métodos PRK ($\sigma, 2$)

Considerando para a classe dos $PRK(\sigma, 2)$, as devidas expansões em série de Taylor, determinamos as condições de ordem para que o método alcance ordem 3, que são:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (5.2a)$$

$$-v_1 + b_1 + b_2 = \sigma, \quad (5.2b)$$

$$v_1 - 2b_1 = \sigma^2, \quad (5.2c)$$

$$-v_1 + 3b_1 = \sigma^3. \quad (5.2d)$$

A partir de (5.2) determinamos a seguinte família definida por (5.1) com $r = 2$ e ordem 3.

$$\begin{array}{c|cccc} & & & & \\ -1 & & & & \\ 0 & & & & \\ \hline & \sigma^2(\sigma+1) & \sigma(1+2\sigma+\sigma^2) & \sigma^2(2\sigma+3) & 1-2\sigma^3-3\sigma^2 \end{array} \quad (5.3)$$

5.4 A classe de métodos PRK ($\sigma, 3$)

De maneira análoga, determinamos as condições de ordem para que os métodos $PRK(\sigma, 3)$ alcancem ordem 4, dadas a seguir:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (5.4a)$$

$$-v_1 + (b_1 + b_2 + b_3) = \sigma, \quad (5.4b)$$

$$v_1 + 2b_3c_3 - 2b_1 = \sigma^2, \quad (5.4c)$$

$$-v_1 + 3b_3c_3^2 + 3b_1 = \sigma^3, \quad (5.4d)$$

$$-v_1 - 3b_3(2a_{31} + a_3) + 3b_1 = \sigma^3, \quad (5.4e)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3c_3^3 = \sigma^4, \quad (5.4f)$$

$$v_1 - 4b_1 + 4b_3(a_3 + 3a_{31}) = \sigma^4, \quad (5.4g)$$

$$v_1 - 4b_1 - 4b_3c_3(a_3 + 2a_{31}) = \sigma^4. \quad (5.4h)$$

Considerando as condições de (5.4), encontramos a seguinte família de métodos $PRK(\sigma, 3)$ com ordem 4, com as restrições $c_3 \neq -1, \frac{-1}{2}, 0$:

$$a_3 = -(3c_3^2 + 2c_3^3),$$

$$a_{32} = c_3 - (a_3 + a_{31}),$$

$$a_{31} = c_3^2 + c_3^3,$$

$$b_1 = \frac{\sigma^2(1+\sigma)(3c_3 + 4c_3^2 - 2\sigma - 3c_3\sigma)}{2 + 6c_3 + 4c_3^2},$$

$$b_3 = \frac{\sigma^2(1+\sigma)^2}{2c_3 + 6c_3^2 + 4c_3^3},$$

$$b_2 = \frac{\sigma(1+\sigma)^2(2c_3 + 4c_3^2 - \sigma - 3c_3\sigma)}{2c_3 + 4c_3^2}, \quad (5.5)$$

$$v_1 = \frac{\sigma^2(6c_3 - 4\sigma + 4c_3\sigma - 3\sigma^2)}{1 + 2c_3},$$

$$v_2 = \frac{(1+\sigma)^2(1 + 2c_3 - 2\sigma - 4c_3\sigma + 3\sigma^2)}{1 + 2c_3}.$$

5.5 A classe de métodos PRK ($\sigma, 4$)

Finalmente, as condições de ordem para que os métodos $PRK(\sigma, 4)$ tenham ordem 4, são dadas por:

$$v_1 + v_2 = 1, \quad (5.6a)$$

$$(-1)^j v_1 + j \sum_{i=1}^r c_i^{j-1} b_i = \sigma^j, \quad (r = 4, j = 1, 2, 3, 4), \quad (5.6b)$$

$$c_3^i = (-1)^{i+1} (a_3 + i a_{31}), \quad (i = 2, 3). \quad (5.6c)$$

$$c_4^i = (-1)^{i+1} a_4 + i((-1)^{i+1} a_{41} + a_{43} c_3^{i-1}), \quad (i = 2, 3). \quad (5.6d)$$

Resolvendo ao sistema constituído pelas equações de (5.6), obtivemos algumas famílias de $PRK(\sigma, 4)$ com orde 4, em função de diferentes escolhas dos coeficientes tomados como parâmetros livres

Se considerarmos c_3 e c_4 como parâmetros livres, obtemos:

$$b_1 = \frac{\sigma^2(1+\sigma)(3c_4 + 4c_4^2 - 2\sigma - 3c_4\sigma)}{2 + 6c_4 + 4c_4^2}, \quad b_2 = \frac{\sigma(1+\sigma)^2(2c_4 + 4c_4^2 - \sigma - 3c_4\sigma)}{2c_4 + 4c_4^2},$$

$$b_3 = 0, \quad b_4 = \frac{\sigma^2(1+\sigma)^2}{2c_4+6c_4^2+4c_4^3}, \quad v_1 = \frac{\sigma^2(6c_4-4\sigma+4c_4\sigma-3\sigma^2)}{1+2c_4},$$

$$v_2 = \frac{(1+\sigma)^2(1+2c_4-2\sigma-4c_4\sigma+3\sigma^2)}{1+2c_4}, \quad a_4 = -(3c_4^2+2c_4^3),$$

$$a_{41} = c_4^2 + c_4^3, \quad a_{43} = 0, \quad a_{31} = c_3^2 + c_3^3, \quad a_3 = -(3c_3^2+2c_3^3),$$

$$a_{42} = c_3 + 2c_3^2 + c_3^3, \quad a_{32} = c_2^2 + 2c_2^3 + c_2^4.$$

Para que o método $PRK(\sigma, 4)$ alcance ordem 5, além de satisfazer às condições de ordem determinadas em (5.6), terão que ser satisfeitas também as seguintes condições :

$$(-1)^j v_1 + j \sum_{i=1}^r c_i^{j-1} b_i = \sigma^j, \quad (r=4, j=5), \quad (5.7a)$$

$$-v_1 + 5b_1 - 5b_3(a_3 + 4a_{31}) - 5b_4(a_4 + 4a_{41} - 4a_{43}c_3^3) = \sigma^5, \quad (5.7b)$$

$$c_4^i = (-1)^{i+1} a_4 + i((-1)^{i+1} a_{41} + a_{43}c_3^{i-1}), \quad (i=2,3). \quad (5.7c)$$

Considerando as equações de (5.6) e as de (5.7a) e (5.7c) encontramos uma outra família de métodos $PRK(\sigma, 4)$ com ordem 4 tendo agora a_{43} , c_3 , c_4 como parâmetros livres, dada por:

$$a_4 = 6a_{43}(c_3 + c_3^2) - 3c_4^2 - 2c_4^3, \quad a_{41} = -a_{43}(2c_3 + 3c_3^2) + c_4^2 + c_4^3,$$

$$a_{42} = c_4 - (a_4 + a_{41} + a_{43}),$$

$$b_1 = \frac{-6b_4c_3c_4 - 8b_4c_3^2c_4 + 6b_4c_4^2 - 12c_3^2c_4^2 + 8b_4c_4^3 + 12b_4c_3c_4^3 + 3c_3\sigma^2 + 4c_3^2\sigma^2 - 2\sigma^3 + 4c_3^2\sigma^3 - 2\sigma^4 - 3c_3\sigma^4}{2+6c_3+4c_3^2}$$

$$b_2 = \sigma + v_1 - b_1 - b_3 - b_4, \quad b_3 = \frac{\sigma^2(\sigma+1)^2 - 2(2c_4^2+c_4)(c_4+1)b_4}{2c_3(2c_3+1)(c_3+1)},$$

$$b_4 = \frac{\sigma^2(\sigma+1)^2(c_3(5c_3+3)-2\sigma(2c_3+1))}{2c_4(c_4+1)(c_4-c_3)(10c_3c_4+5(c_3+c_4)+3)}, \quad (5.8)$$

$$v_1 = \frac{-12b_4c_3c_4 + 12b_4c_4^2 - 12b_4c_4^2c_3 + 12b_4c_4^3 + 6c_3 + 4\sigma^3 + 4c_3\sigma^3 - 3\sigma^4}{1+2c_3},$$

$$v_2 = \frac{1+2c_3 + 12b_4c_3c_4 - 12b_4c_4^2 + 12b_4c_3c_4^2 - 12b_4c_4^3 - 6c_3\sigma^2 + 4\sigma^3 - 4c_3\sigma^3 + 3\sigma^4}{1+2c_3},$$

onde a_3, a_{31} e a_{32} são os mesmos determinados em (5.5) e $c_3 \neq -1, \frac{-1}{2}, 0$, $c_3 \neq c_4$ e $c_4 \neq -1, 0$.

Observe que essa família de $PRK(\sigma, 4)$ tem apenas ordem 4 pois não consideramos a condição (5.7b). Para que ela fosse de ordem 5, teríamos que também considerar (5.7b) e através dela determinar um dos coeficientes deixados com parâmetros livres a_{43}, c_3, c_4 . Mas isto equivale a expressarmos a_{43}, c_3 ou c_4 em função do parâmetro σ , pois (5.7b) depende de σ . Isto não nos convém, já que nosso objetivo é manter todos os coeficientes c_i, a_i e a_{ij} , independentes de σ para que possamos reaproveitar os k_i 's já determinados para a obtenção de y_{n+1} , não acarretando avaliações adicionais da derivada $f(x, y)$. Portanto, concluímos que para o nosso interesse atual a ordem máxima alcançável será 4.

Podemos também obter alguns casos particulares para essa especial classe de métodos $PRK(\sigma, 3)$, com ordem 4, se atribuirmos valores para c_3 em (5.5).

Para $c_3 = \frac{1}{2}$ e $c_3 = 1$, encontramos os métodos:

-1					
0					
$\frac{1}{2}$					
	-1	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$		
	$\frac{\sigma^2(5-2\sigma-7\sigma^2)}{12}$	$\frac{(4-5\sigma)\sigma(1+\sigma)^2}{4}$	$\frac{\sigma^2(1+\sigma)^2}{3}$	$\frac{\sigma^2(3-2\sigma-3\sigma^2)}{2}$	$\frac{2-3\sigma^2+2\sigma^3+3\sigma^4}{2}$

-1					
0					
1					
	-5	2	4		
	$\frac{\sigma^2(7+2\sigma-5\sigma^2)}{12}$	$\frac{(3-2\sigma)\sigma(1+\sigma)^2}{3}$	$\frac{\sigma^2(1+\sigma)^2}{12}$	$2\sigma^2 - \sigma^4$	$(-1+\sigma^2)^2$

Da mesma maneira, para a família de métodos $PRK(\sigma,4)$, podemos determinar alguns métodos particulares, a partir de (5.8).

Se tomarmos $c_3 = \frac{7}{10}$ e $c_4 = 1$, obtemos:

-1					
0					
$\frac{7}{10}$					
	$\frac{-539}{250}$	$\frac{833}{1000}$	$\frac{2023}{1000}$		
1	$\frac{-250+357a_{32}}{50}$	$\frac{200-287a_{32}}{100}$	$\frac{400-527a_{32}}{100}$	a_{32}	
	$\frac{\sigma^2(1+\sigma)(721-1235\sigma+560\sigma^2)}{2516}$	$\frac{\sigma(1+\sigma)^2(259-402\sigma+172\sigma^2)}{259}$	$\frac{2000(4-3\sigma)\sigma^2(1+\sigma)^2}{13209}$	$\frac{\sigma^2(1+\sigma)^2(-91+96\sigma)}{444}$	$v_1 \quad v_2$

$$v_1 = \frac{\sigma^2(42 - 40\sigma - 21\sigma^2 + 24\sigma^3)}{37}, \quad v_2 = \frac{(1 + \sigma)^2(37 - 74\sigma + 69\sigma^2 - 24\sigma^3)}{37}.$$



Capítulo 6

AVALIAÇÕES COMPUTACIONAIS

6.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados numéricos considerando a integração através de métodos *Pseudo Runge-Kutta* pertencentes às famílias apresentadas nos capítulos anteriores.

Consideramos problemas testes encontrados na literatura, cuja solução exata é conhecida, para que além de compararmos os métodos entre si pudéssemos também analisar o erro absoluto.



6.2 Problemas testes

Para a avaliação de desempenho de alguns particulares métodos *Pseudo Runge - Kutta*, representativos de cada uma das classes de métodos apresentados nos capítulos anteriores, consideremos os problemas teste relacionados a seguir, com a respectiva solução exata:

1. $y' = \frac{3x^2}{y}$, $y(2) = 4$ e $y(x) = x\sqrt{2x}$.

2. $y' = -2xy^2$, $y(0) = 1$ e $y(x) = \frac{1}{1+x^2}$.

3. $y' = \frac{1}{1+x^2} - 2y^2$, $y(0) = 0$ e $y(x) = \frac{x}{1+x^2}$.

4. $y' = \frac{-y^2}{1+x}$, $y(0) = 1$ e $y(x) = \frac{1}{1+\ln(1+x)}$.

5. $y' = \sin(x) - y$, $y(0) = \frac{1}{2}$ e $y(x) = \frac{1}{2}(\sin(x) - \cos(x)) + e^{-x}$.

6. $y' = y - \frac{2x}{y}$, $y(0) = 1$ e $y(x) = \sqrt{2x+1}$.

7. $y' = x^2 - 1$, $y(0) = 0$ e $y(x) = \frac{x^3}{3} - x$.

8. $y' = \frac{y}{4}(\frac{y}{20} - 1)$, $y(0) = 1$ e $y(x) = \frac{20}{(1+19e^{x/4})}$.

9. $y' = 4x\sqrt{y}$, $y(0) = 1$ e $y(x) = (1+x^2)^2$.



$$10. y'' + y = x, \quad y(0) = 0 \quad \text{e} \quad y(x) = x + \text{sen}(x),$$

$$y'(0) = 2 \quad \text{e} \quad y'(x) = 1 + \cos(x).$$

$$11. y''x^2 + xy' + y = \log(x), \quad y(1) = 0 \quad \text{e} \quad y(x) = \log(x) + \text{sen}(\log(x)),$$

$$y'(1) = 2 \quad \text{e} \quad y'(x) = \frac{1}{x} + \cos(\log(x)) \frac{1}{x}.$$

$$12. 4y'' + y = -2, \quad y(0) = 0 \quad \text{e} \quad y(x) = -2 + 2\cos\left(\frac{x}{2}\right) + \text{sen}\left(\frac{x}{2}\right),$$

$$y'(0) = \frac{1}{2} \quad \text{e} \quad y'(x) = -\text{sen}\left(\frac{x}{2}\right) + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{x}{2}\right).$$

$$13. y'' + y = 0, \quad y(0) = 0 \quad \text{e} \quad y(x) = 2\text{sen}(x),$$

$$y'(0) = 2 \quad \text{e} \quad y'(x) = 2\cos(x).$$

Visando avaliar o desempenho computacional dos métodos *PRK*, comparando-os entre si e com os métodos *RK*, para cada uma das classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta*, estudadas neste trabalho, consideramos um particular método, bem como também consideramos dois métodos de *Runge-Kutta*.

Os métodos considerados são:

Método (1a) - na classe dos *PRK2(3)* o método (2.42), com $p = 4$.

Método (1b) - na classe dos *PRK2(4)* o método (2.46), com $p = 5$.

Método (2a) - na classe dos *PRK(3)* o método (3.24), com $p = 4$.

Método (2b) - na classe dos *PRK(4)* o método (3.25), com $p = 5$.

Método (3) - na classe do método apresentado no capítulo 4, o método (4.16), com $p = 4$.

Método(4a) - na classe dos *RK(4)* o método (1.17), com $p = 4$.

Método(4b) - na classe dos *RK(6)* o método (1.18), com $p = 5$.

6.3 Os resultados

Visando observar também seu desempenho frente a muitos passos de integração, cada um dos problemas anteriormente relacionados foram resolvidos numericamente considerando-se intervalos de integração com amplitudes razoáveis. Para cada problema e todos os métodos a integração foi realizada no intervalo $[a, 100]$. Considerando tal intervalo, pudemos observar o desempenho de cada método em diferentes subintervalos. É importante registrar que em nossa avaliação consideramos a integração a passo fixo de tamanho h durante todo o intervalo, mas avaliando para diferentes tamanhos de h .

Entre todos os resultados obtidos selecionamos alguns, que ao nosso ver traduzem o desempenho dos métodos avaliados.

As tabelas a seguir apresentam o erro absoluto em alguns pontos do intervalo e considerando $h=10^{-i}$ para $i = 1,2,3$.

Tabela 6.1: Erro absoluto para o problema 1.

<i>h=0.1</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
2.5	0.190×10^{-7}	0.441×10^{-7}	0.111×10^{-7}	0.649×10^{-7}
2.8	0.243×10^{-7}	0.695×10^{-7}	0.147×10^{-7}	0.781×10^{-7}
3.0	0.259×10^{-7}	0.730×10^{-7}	0.159×10^{-7}	0.821×10^{-7}
4.0	0.252×10^{-7}	0.710×10^{-7}	0.164×10^{-7}	0.798×10^{-7}
8.0	0.119×10^{-7}	0.376×10^{-7}	0.92×10^{-8}	0.416×10^{-7}
12.0	0.7×10^{-8}	0.216×10^{-7}	0.44×10^{-8}	0.240×10^{-7}
20.0	0.23×10^{-8}	0.77×10^{-8}	0.3×10^{-9}	0.94×10^{-8}
35.0	0.130×10^{-7}	0.65×10^{-8}	0.23×10^{-8}	0.88×10^{-8}
50.0	0.596×10^{-7}	0.410×10^{-7}	0.410×10^{-7}	0.428×10^{-7}
60.0	0.941×10^{-7}	0.605×10^{-7}	0.615×10^{-7}	0.633×10^{-7}
80.0	0.1527×10^{-6}	0.1006×10^{-6}	0.1201×10^{-6}	0.1108×10^{-6}
100.0	0.2105×10^{-6}	0.1546×10^{-6}	0.1658×10^{-6}	0.1621×10^{-6}
<i>h=0.01</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
2.5	0.4×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}
2.8	0.5×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}
3.0	0.6×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}
4.0	0.11×10^{-8}	0.8×10^{-9}	0.7×10^{-9}	0.7×10^{-9}
8.0	0.15×10^{-8}	0.25×10^{-8}	0.29×10^{-8}	0.24×10^{-8}
12.0	0.122×10^{-7}	0.94×10^{-8}	0.534×10^{-7}	0.101×10^{-7}
20.0	0.88×10^{-8}	0.2311×10^{-6}	0.134×10^{-7}	0.148×10^{-7}
35.0	0.1029×10^{-6}	0.1197×10^{-6}	0.1173×10^{-6}	0.1164×10^{-6}
50.0	0.1919×10^{-6}	0.2221×10^{-6}	0.2119×10^{-6}	0.2184×10^{-6}
60.0	0.2692×10^{-6}	0.3101×10^{-6}	0.2682×10^{-6}	0.2971×10^{-6}
80.0	0.4116×10^{-6}	0.4685×10^{-6}	0.4182×10^{-6}	0.4442×10^{-6}
100.0	0.583×10^{-6}	0.6221×10^{-6}	0.6258×10^{-6}	0.6221×10^{-6}
<i>h=0.001</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
2.5	0.2×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.3×10^{-9}
2.8	0.2×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.3×10^{-9}
3.0	0.4×10^{-9}	0.6×10^{-9}	0.6×10^{-9}	0.5×10^{-9}
4.0	0.7×10^{-9}	0.11×10^{-8}	0.7×10^{-9}	0.9×10^{-9}
8.0	0.483×10^{-7}	0.482×10^{-7}	0.478×10^{-7}	0.48×10^{-7}
12.0	0.515×10^{-7}	0.562×10^{-7}	0.533×10^{-7}	0.531×10^{-7}
20.0	0.2448×10^{-6}	0.2311×10^{-6}	0.2395×10^{-6}	0.2375×10^{-6}
35.0	0.12713×10^{-5}	0.12745×10^{-5}	0.13020×10^{-5}	0.12661×10^{-5}
50.0	0.25784×10^{-5}	0.24876×10^{-5}	0.25728×10^{-5}	0.24987×10^{-5}
60.0	0.15646×10^{-5}	0.2459×10^{-6}	0.14883×10^{-5}	0.2757×10^{-6}
80.0	0.10033×10^{-4}	0.11330×10^{-4}	0.10238×10^{-4}	0.11414×10^{-4}
100.0	0.15815×10^{-4}	0.16270×10^{-4}	0.15987×10^{-4}	0.16201×10^{-4}

Tabela 6.2: Erro absoluto para o problema 1

<i>h=0.1</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
2.5	0.145×10^{-7}	0.17×10^{-8}	0.0×10^{-9}
2.8	0.154×10^{-7}	0.20×10^{-8}	0.0×10^{-9}
3.0	0.146×10^{-7}	0.21×10^{-8}	0.0×10^{-9}
5.0	0.57×10^{-8}	0.14×10^{-8}	0.1×10^{-9}
8.0	0.22×10^{-8}	0.4×10^{-9}	0.3×10^{-9}
10.0	0.8×10^{-9}	0.7×10^{-9}	0.4×10^{-9}
20.0	0.26×10^{-8}	0.12×10^{-8}	0.31×10^{-8}
35.0	0.19×10^{-8}	0.102×10^{-7}	0.28×10^{-8}
50.0	0.382×10^{-7}	0.596×10^{-7}	0.396×10^{-7}
60.0	0.689×10^{-7}	0.941×10^{-7}	0.596×10^{-7}
80.0	0.1099×10^{-6}	0.1742×10^{-6}	0.1090×10^{-6}
100.0	0.1565×10^{-6}	0.2850×10^{-6}	0.1602×10^{-6}
<i>h=0.01</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
2.5	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}
2.8	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}
3.0	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}
5.0	0.3×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.3×10^{-9}
8.0	0.24×10^{-8}	0.25×10^{-8}	0.18×10^{-8}
10.0	0.41×10^{-8}	0.41×10^{-8}	0.42×10^{-8}
20.0	0.148×10^{-7}	0.151×10^{-7}	0.148×10^{-7}
35.0	0.1187×10^{-6}	0.1155×10^{-6}	0.1169×10^{-6}
50.0	0.2193×10^{-6}	0.2179×10^{-6}	0.2184×10^{-6}
60.0	0.2643×10^{-6}	0.3027×10^{-6}	0.2962×10^{-6}
80.0	0.4619×10^{-6}	0.4545×10^{-6}	0.4452×10^{-6}
100.0	0.6296×10^{-6}	0.6687×10^{-6}	0.6221×10^{-6}
<i>h=0.001</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
2.5	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.3×10^{-9}
2.8	0.3×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.3×10^{-9}
3.0	0.4×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.4×10^{-9}
5.0	0.126×10^{-7}	0.126×10^{-7}	0.126×10^{-7}
8.0	0.479×10^{-7}	0.482×10^{-7}	0.479×10^{-7}
10.0	0.81×10^{-8}	0.74×10^{-8}	0.7×10^{-8}
20.0	0.2341×10^{-6}	0.2367×10^{-6}	0.2373×10^{-6}
35.0	0.12745×10^{-5}	0.12717×10^{-5}	0.12680×10^{-5}
50.0	0.24973×10^{-5}	0.25048×10^{-5}	0.24997×10^{-5}
60.0	0.14920×10^{-6}	0.1152×10^{-5}	0.2757×10^{-6}
80.0	0.103721×10^{-4}	0.104858×10^{-4}	0.114134×10^{-4}
100.0	0.165571×10^{-4}	0.161601×10^{-4}	0.161938×10^{-4}



Tabela 6.3: Erro absoluto para o problema 2

<i>h=0.1</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.981712×10^{-4}	0.118438×10^{-4}	0.176237×10^{-4}	0.7910×10^{-6}
0.8	0.562104×10^{-4}	0.188088×10^{-4}	0.169610×10^{-4}	0.216×10^{-7}
1.0	0.223560×10^{-4}	0.163789×10^{-4}	0.118563×10^{-4}	0.6022×10^{-6}
5.0	0.999×10^{-7}	0.24×10^{-8}	0.705×10^{-7}	0.428×10^{-7}
8.0	0.233×10^{-7}	0.29×10^{-8}	0.134×10^{-7}	0.73×10^{-8}
10.0	0.104×10^{-7}	0.14×10^{-8}	0.57×10^{-8}	0.31×10^{-8}
20.0	0.7×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.2×10^{-9}
35.0	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.01</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.1×10^{-7}	0.13×10^{-8}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}
0.8	0.45×10^{-8}	0.17×10^{-8}	0.15×10^{-8}	0.0×10^{-9}
1.0	0.18×10^{-8}	0.14×10^{-8}	0.1×10^{-8}	0.1×10^{-9}
5.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
8.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
35.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.001</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
8.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
35.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}



Tabela 6.4: Erro absoluto para o problema 2

<i>h=0.1</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.3302×10^{-6}	0.6969×10^{-6}	0.106×10^{-7}
0.8	0.1052×10^{-5}	0.1875×10^{-6}	0.117×10^{-7}
1.0	0.3077×10^{-6}	0.1904×10^{-6}	0.106×10^{-7}
5.0	0.696×10^{-7}	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}
8.0	0.118×10^{-7}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.49×10^{-8}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
35.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.01</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.0×10^{-7}	0.0×10^{-8}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-8}	0.0×10^{-8}	0.0×10^{-9}
1.0	0.0×10^{-8}	0.0×10^{-8}	0.0×10^{-9}
5.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
8.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
35.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.001</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
8.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
35.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
50.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
60.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
80.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
100.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}



Tabela 6.5: Erro absoluto para o problema 5

<i>h=0.1</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.205×10^{-7}	0.4048×10^{-6}	0.18698×10^{-5}	0.3293×10^{-6}
0.8	0.3008×10^{-6}	0.7220×10^{-6}	0.26651×10^{-5}	0.3345×10^{-6}
1.0	0.5502×10^{-6}	0.8930×10^{-6}	0.29675×10^{-5}	0.2894×10^{-6}
5.0	0.25526×10^{-5}	0.6040×10^{-6}	0.17664×10^{-5}	0.2985×10^{-6}
8.0	0.2493×10^{-5}	0.5017×10^{-6}	0.20357×10^{-5}	0.2097×10^{-6}
10.0	0.16069×10^{-5}	0.11501×10^{-5}	0.16742×10^{-5}	0.3064×10^{-6}
20.0	0.24473×10^{-5}	0.3822×10^{-6}	0.22013×10^{-5}	0.542×10^{-7}
35.0	0.13227×10^{-5}	0.12802×10^{-5}	0.14676×10^{-5}	0.3536×10^{-6}
50.0	0.4372×10^{-6}	0.15631×10^{-5}	0.284×10^{-7}	0.4829×10^{-6}
60.0	0.10176×10^{-5}	0.13891×10^{-5}	0.12336×10^{-5}	0.3941×10^{-6}
80.0	0.25819×10^{-5}	0.1002×10^{-6}	0.21928×10^{-5}	0.945×10^{-7}
88.0	0.3366×10^{-6}	0.15351×10^{-5}	0.6861×10^{-6}	0.4552×10^{-6}
<i>h=0.01</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
8.0	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
10.0	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.2×10^{-9}
20.0	0.7×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.4×10^{-9}
35.0	0.4×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.2×10^{-9}
50.0	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.2×10^{-9}
60.0	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.1×10^{-9}
80.0	0.7×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.5×10^{-9}
88.0	0.1×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.001</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}
8.0	0.17×10^{-8}	0.17×10^{-8}	0.17×10^{-8}	0.17×10^{-8}
10.0	0.16×10^{-8}	0.15×10^{-8}	0.15×10^{-8}	0.15×10^{-8}
20.0	0.49×10^{-8}	0.49×10^{-8}	0.49×10^{-8}	0.49×10^{-8}
35.0	0.22×10^{-8}	0.23×10^{-8}	0.23×10^{-8}	0.23×10^{-8}
50.0	0.14×10^{-8}	0.14×10^{-8}	0.14×10^{-8}	0.14×10^{-8}
60.0	0.16×10^{-8}	0.17×10^{-8}	0.16×10^{-8}	0.17×10^{-8}
80.0	0.235×10^{-7}	0.236×10^{-7}	0.236×10^{-7}	0.236×10^{-7}
88.0	0.9×10^{-9}	0.9×10^{-9}	0.9×10^{-9}	0.1×10^{-8}



Tabela 6.6: Erro absoluto para o problema 5

<i>h=0.1</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.459×10^{-7}	0.91×10^{-8}	0.24×10^{-8}
0.8	0.644×10^{-7}	0.112×10^{-7}	0.28×10^{-8}
1.0	0.710×10^{-7}	0.120×10^{-7}	0.28×10^{-8}
5.0	0.383×10^{-7}	0.83×10^{-8}	0.4×10^{-9}
8.0	0.118×10^{-7}	0.85×10^{-8}	0.0×10^{-9}
10.0	0.452×10^{-7}	0.219×10^{-7}	0.11×10^{-8}
20.0	0.510×10^{-7}	0.181×10^{-7}	0.7×10^{-8}
35.0	0.363×10^{-7}	0.218×10^{-7}	0.11×10^{-8}
50.0	0.49×10^{-8}	0.140×10^{-7}	0.11×10^{-8}
60.0	0.312×10^{-7}	0.213×10^{-7}	0.11×10^{-8}
80.0	0.495×10^{-7}	0.137×10^{-7}	0.2×10^{-8}
100.0	0.191×10^{-7}	0.190×10^{-7}	0.12×10^{-8}
<i>h=0.01</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
8.0	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
10.0	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}
20.0	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}
35.0	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}
50.0	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
60.0	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.2×10^{-9}
80.0	0.4×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.5×10^{-9}
88.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
<i>h=0.001</i>			
<i>Xn</i>	(1b)	(2b)	(4b)
0.5	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
0.8	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.0	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}	0.12×10^{-8}
8.0	0.17×10^{-8}	0.17×10^{-8}	0.17×10^{-8}
10.0	0.15×10^{-8}	0.16×10^{-8}	0.15×10^{-8}
20.0	0.49×10^{-8}	0.49×10^{-8}	0.49×10^{-8}
35.0	0.23×10^{-8}	0.22×10^{-8}	0.23×10^{-8}
50.0	0.14×10^{-8}	0.15×10^{-8}	0.14×10^{-8}
60.0	0.17×10^{-8}	0.16×10^{-8}	0.17×10^{-8}
80.0	0.236×10^{-7}	0.236×10^{-7}	0.236×10^{-7}
88.0	0.9×10^{-9}	0.10×10^{-9}	0.10×10^{-9}



Tabela 6.6: Erro absoluto para o problema 11

<i>h=0.1</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
1.5	0.88301×10^{-5}	0.64014×10^{-5}	0.4398×10^{-6}	0.3344×10^{-6}
1.8	0.22311×10^{-5}	0.107768×10^{-4}	0.1517×10^{-6}	0.4637×10^{-6}
2.0	0.39935×10^{-5}	0.111261×10^{-4}	0.1305×10^{-6}	0.5360×10^{-6}
5.0	0.733651×10^{-4}	0.4835×10^{-5}	0.3355×10^{-5}	0.9198×10^{-6}
8.0	0.933397×10^{-4}	0.12009×10^{-5}	0.43091×10^{-5}	0.8516×10^{-6}
10.0	0.95933×10^{-4}	0.40754×10^{-5}	0.44447×10^{-5}	0.7526×10^{-6}
20.0	0.74475×10^{-4}	0.111541×10^{-4}	0.34953×10^{-5}	0.2394×10^{-6}
35.0	0.310185×10^{-4}	0.131949×10^{-4}	0.15037×10^{-5}	0.2693×10^{-6}
50.0	0.26273×10^{-5}	0.123817×10^{-4}	0.517×10^{-7}	0.5613×10^{-6}
60.0	0.199698×10^{-4}	0.113492×10^{-4}	0.8569×10^{-6}	0.6832×10^{-6}
80.0	0.457697×10^{-4}	0.89725×10^{-5}	0.20594×10^{-5}	0.8303×10^{-6}
100.0	0.632906×10^{-4}	0.66085×10^{-5}	0.28803×10^{-5}	0.8878×10^{-6}
150.0	0.866196×10^{-4}	0.15665×10^{-5}	0.39824×10^{-5}	0.9059×10^{-6}
<i>h=0.01</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
1.5	0.7×10^{-9}	0.9×10^{-9}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
1.8	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-8}	0.0×10^{-9}	0.0×10^{-9}
2.0	0.8×10^{-8}	0.1×10^{-8}	0.1×10^{-9}	0.0×10^{-9}
5.0	0.77×10^{-8}	0.4×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.1×10^{-9}
8.0	0.95×10^{-8}	0.2×10^{-9}	0.6×10^{-9}	0.0×10^{-9}
10.0	0.97×10^{-8}	0.3×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.0×10^{-9}
20.0	0.73×10^{-8}	0.9×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.1×10^{-9}
35.0	0.28×10^{-8}	0.1×10^{-9}	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-9}
50.0	0.8×10^{-9}	0.9×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.4×10^{-9}
60.0	0.26×10^{-8}	0.7×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.5×10^{-9}
80.0	0.55×10^{-8}	0.3×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.7×10^{-9}
100.0	0.73×10^{-8}	0.1×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.9×10^{-9}
150.0	0.98×10^{-8}	0.6×10^{-9}	0.5×10^{-9}	0.1×10^{-8}
<i>h=0.001</i>				
<i>Xn</i>	(1a)	(2a)	(3)	(4a)
1.5	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
1.8	0.0×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
2.0	0.0×10^{-9}	0.2×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.1×10^{-9}
5.0	0.12×10^{-8}	0.8×10^{-9}	0.11×10^{-8}	0.8×10^{-9}
8.0	0.13×10^{-8}	0.8×10^{-9}	0.12×10^{-8}	0.9×10^{-9}
10.0	0.2×10^{-9}	0.4×10^{-9}	0.1×10^{-9}	0.3×10^{-9}
20.0	0.13×10^{-8}	0.18×10^{-8}	0.16×10^{-8}	0.19×10^{-8}
35.0	0.9×10^{-9}	0.16×10^{-8}	0.12×10^{-8}	0.1×10^{-9}
50.0	0.25×10^{-8}	0.3×10^{-9}	0.3×10^{-8}	0.6×10^{-9}
60.0	0.13×10^{-8}	0.15×10^{-8}	0.9×10^{-9}	0.6×10^{-9}
80.0	0.41×10^{-8}	0.73×10^{-8}	0.42×10^{-8}	0.63×10^{-8}
100.0	0.73×10^{-8}	0.104×10^{-7}	0.81×10^{-8}	0.8×10^{-8}
150.0	0.128×10^{-7}	0.119×10^{-7}	0.127×10^{-7}	0.72×10^{-8}



Tabela 6.7: Erro absoluto para o problema12

h=0.1					
Xn	(1a)		(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.310 ×	10 ⁻⁷	0.169 ×	10 ⁻⁷	0.74 × 10 ⁻⁸
0.8	0.226 ×	10 ⁻⁷	0.156 ×	10 ⁻⁷	0.49 × 10 ⁻⁸
1.0	0.18 ×	10 ⁻⁸	0.41 ×	10 ⁻⁸	0.3 × 10 ⁻⁹
5.0	0.13444 ×	10 ⁻⁵	0.7142 ×	10 ⁻⁶	0.2653 × 10 ⁻⁶
8.0	0.8251 ×	10 ⁻⁶	0.4052 ×	10 ⁻⁶	0.1611 × 10 ⁻⁶
10.0	0.29119 ×	10 ⁻⁵	0.15092 ×	10 ⁻⁵	0.5686 × 10 ⁻⁶
20.0	0.4264 ×	10 ⁻⁶	0.1522 ×	10 ⁻⁶	0.814 × 10 ⁻⁷
35.0	0.100937 ×	10 ⁻⁴	0.51916 ×	10 ⁻⁵	0.1957 × 10 ⁻⁵
50.0	0.89330 ×	10 ⁻⁵	0.47656 ×	10 ⁻⁵	0.17323 × 10 ⁻⁵
60.0	0.169459 ×	10 ⁻⁴	0.87049 ×	10 ⁻⁵	0.32758 × 10 ⁻⁵
80.0	0.234394 ×	10 ⁻⁴	0.122354 ×	10 ⁻⁴	0.45305 × 10 ⁻⁵
100.0	0.209206 ×	10 ⁻⁴	0.111872 ×	10 ⁻⁴	0.4046 × 10 ⁻⁵
150.0	0.340025 ×	10 ⁻⁴	0.195952 ×	10 ⁻⁴	0.65862 × 10 ⁻⁵
h=0.01					
Xn	(1a)		(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
0.8	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
1.0	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
5.0	0.2 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
8.0	0.4 ×	10 ⁻⁹	0.3 ×	10 ⁻⁹	0.2 × 10 ⁻⁹
10.0	0.5 ×	10 ⁻⁹	0.4 ×	10 ⁻⁹	0.5 × 10 ⁻⁹
20.0	0.6 ×	10 ⁻⁹	0.1 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
35.0	0.164 ×	10 ⁻⁷	0.158 ×	10 ⁻⁷	0.155 × 10 ⁻⁷
50.0	0.17 ×	10 ⁻⁷	0.181 ×	10 ⁻⁷	0.177 × 10 ⁻⁷
60.0	0.420 ×	10 ⁻⁷	0.406 ×	10 ⁻⁷	0.402 × 10 ⁻⁷
80.0	0.617 ×	10 ⁻⁷	0.615 ×	10 ⁻⁷	0.607 × 10 ⁻⁷
100.0	0.546 ×	10 ⁻⁷	0.567 ×	10 ⁻⁷	0.557 × 10 ⁻⁷
150.0	0.1023 ×	10 ⁻⁶	0.1047 ×	10 ⁻⁶	0.1032 × 10 ⁻⁶
h=0.001					
Xn	(1a)		(2a)	(3)	(4a)
0.5	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
0.8	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
1.0	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 ×	10 ⁻⁹	0.0 × 10 ⁻⁹
5.0	0.29 ×	10 ⁻⁸	0.27 ×	10 ⁻⁸	0.27 × 10 ⁻⁸
8.0	0.55 ×	10 ⁻⁸	0.58 ×	10 ⁻⁸	0.54 × 10 ⁻⁸
10.0	0.58 ×	10 ⁻⁸	0.58 ×	10 ⁻⁸	0.58 × 10 ⁻⁸
20.0	0.28 ×	10 ⁻⁸	0.34 ×	10 ⁻⁸	0.29 × 10 ⁻⁸
35.0	0.1744 ×	10 ⁻⁶	0.1742 ×	10 ⁻⁶	0.1739 × 10 ⁻⁶
50.0	0.2029 ×	10 ⁻⁶	0.2018 ×	10 ⁻⁶	0.2026 × 10 ⁻⁶
60.0	0.1141 ×	10 ⁻⁶	0.1137 ×	10 ⁻⁶	0.1136 × 10 ⁻⁶
80.0	0.6573 ×	10 ⁻⁶	0.6581 ×	10 ⁻⁶	0.6577 × 10 ⁻⁶
100.0	0.7066 ×	10 ⁻⁶	0.7071 ×	10 ⁻⁶	0.7064 × 10 ⁻⁶
150.0	0.11702 ×	10 ⁻⁵	0.11693 ×	10 ⁻⁵	0.11711 × 10 ⁻⁵



CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nos capítulos anteriores desta dissertação, procuramos introduzir algumas classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta*, tendo como objetivo principal, apresentar para cada uma das classes, as respectivas condições de ordem e, a partir daí, construímos famílias de tais métodos.

Conforme pode ser constatado através dos resultados apresentados no capítulo 2, para a classe dos métodos *PRK2(r)* explícitos, a ordem máxima alcançável será $p = r+1$, para $r = 2, 3, 4$.

Os métodos estudados são denominados, por Nakashima [17], métodos de *Runge - Kutta de passo 2*, porém julgamos mais adequado denominá-los métodos *Pseudo Runge-Kutta de passo 2*, seguindo a definição dos métodos apresentados nos capítulos 3, 4, 5.

A característica mais importante desses métodos é a economia de avaliações da função $f(x,y)$, pois a cada passo, efetuamos r avaliações para gerarmos uma aproximação com ordem $p = r+1$. Comparando-os com os métodos de *Runge-Kutta*, observamos que, para estes, devemos efetuar pelo menos seis avaliações por passo se desejamos uma aproximação com ordem 5, enquanto que, através dos *Pseudo Runge-Kutta*, necessitamos de quatro avaliações para que alcancemos a ordem 5. Essa economia de duas avaliações por passo torna-se considerável se necessitamos integrar em um intervalo grande e/ou trabalhamos com um passo de integração pequeno.

Essa mesma característica pode ser identificada nas classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta*, apresentadas no capítulo 3, pois também é válida a relação $p = r+1$, para $r = 2, 3$ e 4, mas considerando que essa classe de métodos tem $(r-1)$ estágios, tal classe para gerar uma aproximação de ordem 5, necessita de 3 avaliações da função por passo, ou seja, é mais



econômico que a classe do capítulo 2, e bem mais econômico que a classe de métodos de *Runge-Kutta*.

No capítulo quatro apresentamos uma classe particular dos métodos *Pseudo Runge-Kutta* introduzidos no capítulo três, considerando nulos alguns dos coeficientes do método. Para tais métodos, observamos que a ordem máxima alcançada será $p = r$, e não mais $p = r+1$. Porém, mesmo tendo sua ordem alcançável $p = r$, e considerando que o número de estágios é sempre igual a $(r-1)$, esses métodos se equivalem a classe de métodos do capítulo 2, quando ao esforço computacional despendido para avaliar as derivadas do problema de valor inicial.

Uma característica desfavorável desses métodos é a necessidade de dependermos de duas condições iniciais para o início da integração, por serem de *passo 2*, o que não acontece com os métodos de *Runge-Kutta*, que são auto-iniciáveis.

Para cada classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta*, apresentamos, como ilustração, alguns exemplos particulares. Sempre que possível, procuramos, na construção dos exemplos, minimizar o erro de truncamento local, utilizando os parâmetros livres para eliminar parcelas do erro.

Por exemplo, para os *PRK2(3)* com ordem $p = 4$, apresentados em (2.43) e (2.44), duas parcelas da expressão do erro que acompanham h^5 foram eliminadas.

Para as classes de métodos *PRK(r)* com ordem $p = r+1$ encontramos um único método se $r = 2$. Portanto, para a classe dos *PRK(2)* com ordem $p = 3$, o único método existente é apresentado em 3.3, à página 48.

Essa mesma situação ocorre quando consideramos, no capítulo 4, a classe particular de *PRK(2)* com ordem $p = 2$, cujo único método existente é o apresentado à página 62.

No capítulo 5, construímos, a partir dos métodos apresentados no capítulo 3, uma classe de métodos *Pseudo Runge-Kutta* que podem se constituir em uma ferramenta extremamente útil para a integração de problemas com saída densa, isto é, quando durante o intervalo de integração necessitamos encontrar aproximações para a solução em pontos muito próximos. Essas avaliações podem ser feitas através dos métodos do capítulo 5, sem a necessidade de novas avaliações da derivada e de uma redução drástica do tamanho do passo h de integração.



Finalmente, os resultados do capítulo seis nos dão uma pequena avaliação qualitativa de todas as classes de métodos *Pseudo Runge-Kutta* analisados, comparando-os entre si e com alguns métodos de *Runge-Kutta* de mesma ordem.

A avaliação computacional por nós realizada não teve como objetivo efetuar um estudo comparativo com outras classes de métodos, no sentido de tirarmos conclusões que possam ser consideradas como padrões de comportamento desses métodos, mas apenas no sentido de ilustrar o desempenho dos mesmos.

Apresentamos no trabalho apenas alguns exemplos, entre os que consideramos e podemos concluir que, para um passo $h < 0,5$, todos eles fornecem aproximações equivalentes.

A experiência adquirida no desenvolvimento deste trabalho nos permite considerar a classe dos métodos *Pseudo Runge-Kutta* como uma opção competitiva para a integração de problemas de valor inicial *não-stiff*.

Uma continuação deste trabalho poderá ser o estudo dos métodos *Pseudo Runge-Kutta* implícitos, analisando-os como ferramenta para problemas *stiff*. Alguns resultados relacionados com a classe desses métodos implícitos, são dados por, Jackiewicz, Renaut e Feldstein [10].

Aplicações de métodos *Pseudo Runge-Kutta* explícitos na discretização de equações diferenciais parciais parabólicas ou hiperbólicas podem ser encontradas em Renaut [20] e Verwer [23], [24] e [25].

Uma outra linha de pesquisa, também interessante, porém que imaginamos com maiores dificuldades, é a busca de métodos *Pseudo Runge-Kutta* embutidos, ferramenta útil para a integração a passo variável. A maior dificuldade dessa investigação não estará na construção de métodos embutidos, mas sim da utilização a passo variável, considerando que estamos trabalhando com métodos de passo dois.

As primeiras investigações relacionadas com a aplicação de métodos *Pseudo Runge-Kutta* na integração a passo variável são encontradas em Jackiewicz e Zennaro [11]. Um particular par de métodos embutidos com ordem 4 e 5 pode ser encontrado em Nakashima [18].



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AVILA, G. S. S., *Cálculo III: Diferencial e Integral*, Brasília, Editora da Universidade de Brasília, 1979.
- [2] BRAUN, M., *Equações Diferenciais e suas aplicações*, Rio de Janeiro, Editora Campos, 1979.
- [3] BUTCHER, J. C., *On the Attainable Order of Runge-Kutta Methods*, Math. Comp., v. 19, 1965, pgs. 408 - 417.
- [4] _____, *A Multistep Generalization of Runge-Kutta Methods with Four or Five Stages*, Journal of the A. C. M., v. 14, nº. 1, 1967, pgs. 84 - 99.
- [5] _____, *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations: Runge-Kutta and General Linear Methods*, Chichester West Sussex, England, John Wiley & Sons Ltda., 1987.
- [6] BYRNE, G. D., *Parameters for Pseudo Runge-Kutta Methods*, Communications A. C. M., v. 10, nº. 2, 1967, pgs. 102 - 104.
- [7] BYRNE, G. D. & LAMBERT, R. J., *Pseudo Runge-Kutta Methods Involving Two Points*, Journal of the A. C. M., v. 13, nº. 1, 1966, pgs. 114 - 123.
- [8] CAIRA, R., COSTABILE, C. & COSTABILE, F., *A Class of Pseudo Runge-Kutta Methods*, BIT 30, 1990, pgs. 642 - 649.
- [9] CUNHA, C., *Métodos Numéricos para as Engenharias e Ciências Aplicadas*, Campinas, Editora da Unicamp, 1993.
- [10] JACKIEWICZ, Z., RENAUT, R. & FELDSTEIN, A., *Two-Step Runge-Kutta methods*, SIAM J. Numer. Anal. 28, 1991, pgs. 1165 - 1182.
- [11] JACKIEWICZ, Z. & ZENNARO, M., *Variable Stepsize Explicit Two-Step Runge-Kutta Methods*, Math. of Computation, 59, nº 200, 1992, pgs.



421 - 438.

- [12] KREIDER, D. L., KULLER, R. G., & OSTBERG, D. R., *Equações Diferenciais*, São Paulo, Editora Universidade de São Paulo, 1972.
- [13] LAMBERT, R. J., *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems, the Initial Value Problem*, John Wiley & Sons Ltda., Chichester West Sussex, 1991.
- [14] LEIGHTON, W., *Equações Diferenciais Ordinárias*, Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos Editora LTDA., 1970.
- [15] NAKASHIMA, M., *On Pseudo Runge-Kutta Methods with 2 and 3 Stages*, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 18, 1982, pgs. 895 - 909.
- [16] _____, *On a Pseudo Runge-Kutta Method of Order 6*, Proc. Japan Acad., 58, 1982, pgs. 66 - 68.
- [17] _____, *Pseudo Runge-Kutta Processes*, Publ. RIMS, Kyoto Univ., 23, 1987, pgs. 583 - 611.
- [18] _____, *Embedded Pseudo Runge-Kutta Methods*, SIAM J. on Num. Analysis, v. 28, nº. 6, 1991, pgs. 1790 - 1802.
- [19] MARTINS, S. P. & ZAPATA, C. A., *As Condições de Ordem para algumas Classes de Métodos Pseudo Runge-Kutta*, Resumos do XIX CNMAC, Goiânia, 1996, pgs. 315 - 316.
- [20] RENAUT, R., *Two-Step Runge-Kutta and Hyperbolic partial differential equations*, Math. Comp., 55, 1990, 563 - 579.
- [21] ROSEN, J. S., *Multi-Step Runge-Kutta methods*, NASA Technical Note, NASA TND - 4400, 1968.
- [22] TREMBLAY, J. P. & BUNT, R. B., *Ciência dos Computadores*, São Paulo, McGraw-Hill do Brasil, 1983.
- [23] VERWER, J. G., *Muiltipoint Multistep Runge-Kutta methods I: On a class of two-step methods for parabolic equations*, Report NW 30/76, Mathematisch Centrum, Department of Numerical Mathematics,



Amsterdam, 1976.

- [24] _____, *Multipoint Multistep Runge-Kutta methods II: The construction of a class of stabilized three-step methods for parabolic equations*, Report NW 31/76, Mathematisch Centrum, department of Numerical Mathematics, Amsterdam, 1976.
- [25] _____, *An implementation of a class of stabilized explicit methods for the time integration of parabolic equations*, ACM Trans. Math., software 6, 1980, pgs. 188 - 205.



